

Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física “Gleb Wataghin”

Tese de Doutorado

**Propriedades Dinâmicas
em Sistemas Quânticos
de Muitos Corpos**

Autor: Julio Garcia Carvalho

Orientador: Prof. Dr. Guillermo Cabrera

Tese submetida ao Instituto de Física “Gleb Wataghin” como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Ciências pela Universidade Estadual de Campinas.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Guillermo Cabrera – DFMC/IFGW/UNICAMP


Prof. Dr. Wagner Figueiredo – DF/UFSC

Prof. Dr. Valter Luiz Líbero – IFSC/USP

Prof. Dr. Bernardo Laks – DFA/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Roberto Luzzi – DFMC/IFGW/UNICAMP

Este exemplar corresponde à redação final da tese de doutorado defendida pelo aluno Julio Garcia Carvalho e aprovada pela Comissão Julgadora.


Campinas, 7 de junho de 2006

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

C253p

Carvalho, Júlio Garcia

Propriedades dinâmicas em sistemas quânticos de
muitos corpos / Júlio Garcia Carvalho. -- Campinas, SP:
[s.n.], 2006.

Orientador: Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún.
Tese (doutorado) - Universidade Estadual de
Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".


1. Relaxação do spin. 2. Interferência quântica.
3. Sistemas de baixa dimensão. 4. Flutuações quânticas.
5. Emaranhamento quântico. I. Cabrera Oyarzún,
Guillermo Gerardo. II. Universidade Estadual de
Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

(vsv/ifgw)

- **Título em inglês:** Dynamical properties in quantum many body systems.
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
 - 1. Spin relaxation
 - 2. Quantum interference
 - 3. Low dimensional systems
 - 4. Quantum fluctuations
 - 5. Quantum entanglement
- **Área de concentração:** Física da Matéria Condensada
- **Titulação:** Doutor em ciências
- **Banca examinadora:**
 - Prof. Guillermo Cabrera
 - Prof. Wagner Figueiredo
 - Prof. Valter Luiz Líbero
 - Prof. Bernardo Laks
 - Prof. Roberto Luzzi
- **Data da defesa:** 07.06.2006

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **JULIO GARCIA CARVALHO – RA 941324** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 07 / 06 / 2006.

COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún (Orientador do Candidato) –
DFMC/IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Wagner Figueiredo – DF/UFSC



Prof. Dr. Valter Luiz Líbero – IFSC/USP



Prof. Dr. Bernardo Laks – DFA/IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Roberto Luzzi – DFMC/IFGW/UNICAMP

Agradecimentos

Ao meu pai Renê e à minha mãe Iná pela dedicação incondicional. À minha irmã Elisa pela presença constante.

Ao Professor Cabrera pela orientação marcada por sua capacidade de discernir os objetivos mais relevantes a serem perseguidos e os aspectos mais fundamentais a serem apreciados.

Aos colegas de grupo. Daniel Tygel por compartilhar análises sobre a relaxação das cadeias XY. Bruno Uchoa, Ricardo Paupitz, Ary Perez, Eduardo Peres, Lázaro Macedo, Antônio Maia, José Daniel Reis, César Dartora e Marcelo Donizeti pela convivência.

Ao Professor Igor Polikarpov, atualmente no IFSC-USP, pelo incentivo no início do meu programa de doutorado em cristalografia de proteínas no LNLS.

Ao Professor Alberto Tannús, IFSC-USP, pela exposição de princípios de NMR e pelo apoio computacional.

Ao colega Gustavo Rigolin pelas suas exposições sobre emaranhamento e por contribuir com algumas idéias.

Aos colegas de sala Alexandre Ribeiro e Marcus Vinícius por discussões sobre muitos temas.

Aos colegas Ricardo Sato, Pablo Muñoz, Walter Melo, Ricardo Avelino, Carlos Todero e Fernando Sato pela imensa ajuda para lidar com *latex* e *linux*.

Ao IFGW por ter disponibilizado amplos recursos através da Comissão de Pós Graduação, da Secretaria do DFMC, da Biblioteca e do Centro de Computação.

Às agências de pesquisa CAPES, CNPq e FAPESP pelo apoio financeiro.

Ao LNLS pela possibilidade de iniciar meu programa de doutorado na área de cristalografia de proteínas.

Resumo

Os sistemas quânticos de spin são caracterizados por espaços de estados muito grandes, cujas dimensões crescem exponencialmente com o número de partículas. Se após a preparação do estado inicial, o sistema for mantido isolado de variáveis externas, desenvolve-se uma evolução temporal unitária prescrita pela equação de Schrödinger ou pela equação de Liouville. O sistema é movido exclusivamente por flutuações quânticas, as quais têm sua origem no Princípio da Incerteza. A evolução de um estado quântico ou de valores médios de observáveis físicos ou de operadores matemáticos não observáveis pode envolver todos os estados do espaço de estados, ou frações grandes ou pequenas do número total de estados. A análise da relaxação de um sistema de spins desde um estado inicial arbitrário até o equilíbrio apresenta a dificuldade de requerer em geral um número extraordinariamente grande de auto-estados e autovalores. Neste trabalho o maior interesse está na evolução das componentes de Fourier da magnetização em sistemas de baixa dimensão espacial, com spins $\frac{1}{2}$ e cujas interações sejam dadas pela troca modelada por Hamiltonianos de Heisenberg com anisotropia axial, XXZ. Serão obtidas soluções exatas: numéricas ou analíticas. A motivação proveio de trabalhos anteriores realizados no grupo de pesquisa referentes a famílias do Hamiltoniano XY. Ao se considerar o Hamiltoniano XXZ, analisou-se especialmente o subespaço definido por magnetização total nula e o subespaço de uma onda de spin, onde trataram-se cadeias com até 14 e 1200 sítios, respectivamente. Há emergência de processos rápidos e lentos de relaxação, os quais dependem das interações e do estado inicial, e resultam de interferência quântica destrutiva ou construtiva. Serão discutidas conexões entre a presença desses processos e a estrutura do espectro de energia. Finalmente serão analisadas as evoluções temporais de algumas medidas de emaranhamento global, a partir de estados contidos no subespaço de uma onda de spin: a dinâmica considerada cria emaranhamento global até cada medida atingir uma saturação.

Abstract

Quantum spin systems are characterized by huge spaces of states, whose dimensions grow exponentially with the particles number. If following the preparation of the initial state, the system is kept isolated from external variables, it will develop a unitary time evolution according to Schrödinger equation or to Liouville equation. The system is driven exclusively by quantum fluctuations, whose origin is the Uncertainty Principle. The evolution of a quantum state or a physical observable or mathematical nonobservable operator mean values may involve all states of the whole space of states, or big or small fractions of the total number of states. The analysis of the relaxation of a spin system from an arbitrary initial state to the equilibrium has to cope in general with the difficulty of requiring an extraordinarily great number of eigenstates and eigenvalues. In this work the main interest is centered on the evolution of magnetization's Fourier components in low dimensional systems of spins $\frac{1}{2}$, whose interactions be given by the exchange modeled by Heisenberg Hamiltonians with axial anisotropy, XXZ. Exact solutions, analitic or numeric, are obtained. This is the continuation of work done in our research group which dealt with XY Hamiltonian families. In the analysis of the systems with the Hamiltonian XXZ, it was specially analysed the subspace defined by null total magnetization and the subspace defined by one spin wave, where chains up to 14 and 1200 were treated, respectively. There are emergence of fast and slow relaxation processes, which depend on the interations and on the initial state, and which result from destructive or constructive quantum interferences. Connections between the presence of those processes and the energy spectrum structure is discussed. Finally, the time evolution of some measures of global entanglement from initial states in the subspace of one spin wave are analised: the considered dynamics creates global entanglement until each entanglement measure reaches a saturation.

Notação

Ao longo do texto foram utilizadas palavras estrangeiras, *gap*, *nesting* e *ensemble*. Elas não foram traduzidas porque contêm significados específicos dentro da área de estado sólido e têm seu uso difundido na comunidade dessa área de pesquisa. Entretanto, para identificá-las como palavras estrangeiras serão escritas sempre em itálico.

Ao se escreverem os números na forma decimal será tomada a liberdade de se utilizar a convenção adotada no inglês, a qual difere da convenção adotada no português pela substituição da vírgula pelo ponto. Essa mudança de convenção ajusta-se à convenção utilizada nos programas gráficos.

Conteúdo

Agradecimentos	v
Resumo	vii
Abstract	ix
Notação	xi
Lista de Figuras	xvii
Lista de Tabelas	xxiii
1 Introdução	1
1.1 Sistema Fechado	1
1.2 Dinâmica de Não Equilíbrio	3
1.3 Problema Específico	4
1.4 Parte da Informação	5
2 Diagonalização Numérica	7
2.1 Simetrias do Problema	7
2.1.1 Simetrias nas Coordenadas de Spin	8
2.1.2 Simetrias nas Coordenadas Espaciais	9
2.2 Construção das Bases	11
2.2.1 Elementos do Grupo em Termos de Ciclos de Permutações	12
2.2.2 Representações Irredutíveis do grupo D_N	12
2.2.3 Dimensões de Subespaços	15
2.2.4 Construção da base de estados definidos pelas simetrias espaciais	17
2.3 Matriz do Hamiltoniano	19
2.3.1 Teste de Consistência	20

2.3.2	XXZ — CCP — força bruta	21
2.3.3	XXZ — CCP — D_N — autovalor nulo de S^z	21
2.3.4	Uma Onda	24
3	Magnetização e Troca XY	27
3.1	Não Homogeneidade e sua Evolução Temporal	27
3.1.1	Equilíbrio	29
3.2	Cálculos Analíticos Anteriores: Famílias XY	30
3.2.1	Limite Assintótico sem Campo Transverso	34
3.2.2	<i>Nesting</i>	37
3.2.3	Objetivo inicial	39
3.3	XY(γ) Sistema Finito comparado com o Infinito	39
3.3.1	Reconstruções e Coincidências	40
3.3.2	Criticalidade da Relaxação da Magnetização	46
3.4	XY(h, γ) Finito	51
3.4.1	Criticalidades: inspeção das formas das funções $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$	52
3.4.2	Criticalidades: ajustes com lei de potência	61
4	Magnetização e Troca de Heisenberg	67
4.1	Cálculo Numérico — XYZ S_Q^α	67
4.1.1	Desacoplamento de Subespaços	69
4.1.2	O sinal da Constante de Troca	70
4.2	Validade do cálculo — $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$ XYZ	72
4.2.1	$\langle S_Q^z \rangle_t$, XY — $\rho_0(S^z)$ vs $ M_l\rangle$	72
4.2.2	$\langle S_Q^z \rangle_t$, XY — $ M_l\rangle$ vs superposições de $ M_l\rangle$	75
4.2.3	$\langle S_Q^\alpha \rangle_t$ XYZ — Testes de Consistência	76
4.3	XXZ — $\langle S_Q^z \rangle_t$, autovalor nulo de S^z	77
4.3.1	XXZ — força bruta	78
4.3.2	XXZ — simetrias espaciais	80
4.3.3	$\langle S_Q^z \rangle_t$, XX — $ M_l\rangle$, $ P_r^\beta\rangle$ e $\rho_0(S^z)$	86
4.3.4	XXZ — gap, $ M_l\rangle$ e $ P_r^\beta\rangle$	87
4.4	XXZ — uma onda	93
4.4.1	uma onda sem impurezas e sem interações entre segundos vizinhos	96
4.4.2	uma onda com interações entre segundos vizinhos	100
4.4.3	uma onda com impurezas	107
4.5	XXZ — duas ondas	109

4.6	Recorrência e Fidelidade	112
4.6.1	Motivação	112
4.6.2	Definições	112
4.6.3	Reversibilidade	113
4.6.4	Uma e Duas ondas	115
4.6.5	Autovalor nulo de S^z	117
5	Emaranhamento	125
5.1	Concorrência	127
5.2	Emaranhamento Global - Wei	128
5.3	Medida Q - Meyer e Wallach	129
5.4	n -tangle	130
5.5	Localização	130
5.6	Dois Regimes	132
5.7	Resultados e Comparações	133
5.7.1	Sistemas pequenos	134
5.7.2	Patamar de Saturação	135
5.7.3	Coincidências entre as evoluções de sistemas com números de sítios diferentes . . .	136
5.7.4	Tempos de reconstrução e de saturação	136
5.7.5	Localização e Emaranhamento	138
5.7.6	Estados $ W_N\rangle$	139
5.8	Segundos Vizinhos	140
5.8.1	Recorrência e Fidelidade	140
5.8.2	Emaranhamento e $\langle S_Q^z \rangle_t$	140
5.8.3	Reconstruções e Saturação	140
6	Conclusões	145
6.1	$XY(\gamma)$ e $XY(h, \gamma)$	145
6.1.1	XY — topologia, <i>nesting</i>	147
6.2	Cálculo numérico	147
6.2.1	$XY(\gamma)$	147
6.2.2	XYZ — consistência	148
6.2.3	Modos longitudinais e transversais	148
6.2.4	XXZ — simetrias espaciais	149
6.2.5	14 sítios — relaxação rápida	149
6.2.6	14 sítios — ondas estacionárias	150

6.2.7	Um spin girado	150
6.2.8	Recorrência e Fidelidade	151
6.2.9	Partículas independentes e não independentes	152
6.2.10	Simetrias Escondidas — Degenerescências	152
6.2.11	Impurezas	154
6.2.12	Periodicidade	154
6.2.13	Temperatura de Spin	155
6.2.14	Computação Quântica	155
6.3	Emaranhamento	156
6.4	Trabalhos correlacionados em andamento	156
A	Simetrias	159
A.1	Hamiltoniano em Blocos	159
A.1.1	Auto-estados de Operadores Spin	160
A.2	Operador de Projeção de um Grupo Finito	161
A.3	Inversão Temporal	161
A.4	Possíveis degenerescências — inversão temporal	162
A.4.1	Inversão Temporal e o grupo D_N	163
A.4.2	Teste de Frobenius-Schur	164
B	Quatro sítios	165
B.1	Diagonalização com Teoria de Grupos	165
B.1.1	Dimensões dos Subespaços	170
B.2	Evoluções das Não Homogeneidades da Magnetização	171
B.2.1	Elementos de matriz de S_Q^z	171
B.2.2	Evolução de $\langle S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z \rangle_t$	173
	Bibliografia	174

Lista de Figuras

2.1	Algumas operações de simetria da cadeia com CCP.	11
2.2	Ligações associadas à impurezas.	26
2.3	Banda do subespaço de uma onda. Impurezas, anisotropia axial da troca e <i>gap</i>	26
3.1	$(2 - C_{k,Q}) \cos \Omega^+ t$ vs k , (3.20). $N = 1200$, $\gamma = 0.5$. (a) $Q = \frac{280}{600}\pi$, $t = 4716.7$, (b) $Q = \frac{240}{600}\pi$, $t = 2747.8$	35
3.2	Criticalidade de ν . Estado inicial, $\rho_0(S^z)$	37
3.3	<i>Nesting</i> . $\gamma = 0.5$. ω_k vs k , (3.17). $\frac{\partial \omega_k}{\partial k}$ vs k . $\frac{\partial^2 \omega_k}{\partial k^2}$ vs k	38
3.4	$\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ vs t (3.37) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ vs t (3.38). $N = 60, 36, 12, 6$, $\gamma = 0.6$, $Q = \frac{\pi}{3}$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$	41
3.5	Frequências de Rabi, $\langle S_Q^z \rangle_t$ vs t , $\gamma = 0.6$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $N = 4$, $Q = \frac{\pi}{2}$. (b) $N = 6$, $Q = \frac{\pi}{3}$	42
3.6	Coincidências de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ para cadeias com números de sítios diferentes.	44
3.7	Tempos transcorridos até a primeira reconstrução parcial de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ (3.37) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38). $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) t_r^\pm vs γ para $Q = \frac{2\pi}{5}$, (b) t_r^\pm vs Q para $\gamma = 0.5$	45
3.8	Ω^+ vs k . $\gamma = 0.5$. $Q = 0, 0.3\pi, Q_c, 0.5\pi, \pi - Q_c, \pi$	46
3.9	Ω^- vs k . $\gamma = 0.5$. $Q = 0, 0.1\pi, 0.5\pi, 0.9\pi, \pi$	47
3.10	$\frac{\partial^n \Omega^+}{\partial k^n}$ vs k . $\gamma = 0.5$, $Q = Q_c$, $n = 1, 2, 3, 4$	47
3.11	Envolvente ‘superior’ monotonicamente decrescente.	47
3.12	Ajustes de ν e ν^+ em $\langle S_Q^z \rangle_t$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $Q = \frac{2\pi}{5}$, ν vs γ e ν^+ vs γ . (b) $\gamma = 0.5$, ν vs Q e ν^+ vs Q	48
3.13	Ajustes de ν^- em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $Q = \frac{2\pi}{5}$, ν^- vs γ . (b) $\gamma = 0.5$, ν^- vs Q	49

- 3.14 Ajustes de τ em $\langle S_Q^z \rangle_t$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $Q = \frac{2\pi}{5}$, $\frac{1}{\tau}$ vs γ e $\frac{\partial^2 \Omega^\pm}{\partial k^2} \Big|_{k=k_e}$ vs γ . (b) $\gamma = 0.5$, $\frac{1}{\tau}$ vs Q e $\frac{\partial^2 \Omega^\pm}{\partial k^2} \Big|_{k=k_e}$ vs Q . $k_e = o_1^+, o_2^+, o_3^+, o_4^+, o_5^+, o_1^-$ e o_2^- (3.29). 49
- 3.15 Ajustes de τ^+ em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $Q = \frac{2\pi}{5}$, $\frac{1}{\tau^+}$ vs γ e $\frac{\partial^2 \Omega^+}{\partial k^2} \Big|_{k=k_e}$ vs γ . (b) $\gamma = 0.5$, $\frac{1}{\tau^+}$ vs Q e $\frac{\partial^2 \Omega^+}{\partial k^2} \Big|_{k=k_e}$ vs Q . $k_e = o_1^+, o_2^+, o_3^+, o_4^+$ e o_5^+ , (3.29). 50
- 3.16 Ajustes de τ^- em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $Q = \frac{2\pi}{5}$, $\frac{1}{\tau^-}$ vs γ e $\frac{\partial^2 \Omega^-}{\partial k^2} \Big|_{k=k_e}$ vs γ . (b) $\gamma = 0.5$, $\frac{1}{\tau^-}$ vs Q e $\frac{\partial^2 \Omega^-}{\partial k^2} \Big|_{k=k_e}$ vs Q . $k_e = o_1^-$ e o_2^- , (3.29). 50
- 3.17 $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ vs t (3.37). $N = 1200$, $\gamma = 0.5$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$ 52
- 3.18 Batimento tênue. $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ vs t (3.37), detalhe. $N = 1200$, $\gamma = 0.5$, $Q = \frac{359}{600}\pi \sim \pi - Q_c$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. $\langle S_Q^z \rangle_{t=0}^{(+)} = 0.548$. O tempo t está em unidades arbitrárias. 53
- 3.19 $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ vs t (3.38), detalhes. $N = 1200$, $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$ 54
- 3.20 $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ vs t (3.37), detalhes. $N = 1200$, $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$ 55
- 3.21 Vales da Curva de Dispersão (3.17) e criticalidade do tipo (A). 56
- 3.22 Curva de Dispersão ω_k vs k , (3.17). $h = 0.2, 0.5, 0.8, 1.0$, $\gamma = 0, 0.2, 0.5, 0.8$ 58
- 3.23 Q_A vs h e Q_B vs h . $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $\gamma = 0.1$, (b) $\gamma = 0.5$, (c) $\gamma = 0.9$. 59
- 3.24 Patamar de oscilação de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ logo antes de manifestar-se a primeira reconstrução parcial da magnetização P_r vs $1/N$. $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. Obtido da Tabela 3.4. 60
- 3.25 Tempos transcorridos até a primeira reconstrução parcial de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ (3.37) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38). (a) t_r^\pm vs γ para $h = 0.2$ e $Q = \frac{2\pi}{5}$, (b) t_r^\pm vs Q para $h = 0.2$ e $\gamma = 0.5$, (c) t_r^\pm vs h para $\gamma = 0.5$ e $Q = \frac{2\pi}{5}$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$ 62
- 3.26 Ajustes de ν^- e ν^+ em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ (3.37). $N = 1200$ e 12000 . Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. (a) ν^- vs Q . (b) ν^+ vs Q 64
- 3.27 Ajustes de τ^- e τ^+ em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ (3.37). $N = 1200$ e 12000 . Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. (a) $\frac{1}{\tau^-}$ vs Q . (b) $\frac{1}{\tau^+}$ vs Q 64
- 3.28 Ω^- vs k . $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$, $Q = 0, 0.3\pi, 0.7\pi$, " Q_A " = $\frac{496}{600}\pi, 0.8\pi, \pi$ 65
- 3.29 Ω^+ vs k . $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$, $Q = 0, 0.3\pi$, " Q_B " = $\frac{329}{600}\pi, 0.6\pi, 0.7\pi, 0.8\pi, \pi$ 65
- 3.30 $\frac{\partial^n \Omega^-}{\partial k^n}$ vs k , $Q = Q_A$. $\frac{\partial^n \Omega^+}{\partial k^n}$ vs k , $Q = Q_B$. $n = 1, 2, 3$. $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$ 66
- 4.1 $\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0$ vs t . XY(γ), $N = 10$, $\gamma = 0.8$. Estados iniciais: $\rho_0(S^z)$, $|419\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$, e $|163\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$. (a) $Q = 1\frac{2\pi}{N}$, (b) $Q = 2\frac{2\pi}{N}$ 73
- 4.2 Frequências de Rabi. $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t . Heisenberg isotrópico XXX, $\Delta = 1$, $J^{(1)} = 1$, $N = 4$, $Q = \frac{1}{2}\pi$. Estado inicial, $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ 77
- 4.3 $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t . XXZ, $J^{(1)} = 1$, $\Delta = 0, 1$, $N = 10$, $Q = \frac{1}{5}\pi$. Estado inicial, $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . Extinção rápida para $\Delta \neq 0$. 79

- 4.4 $\langle S_Q^z \rangle_t$ vs t . Heisenberg isotrópico, XXX, $\Delta = 1$. $J^{(1)} = 1$, $N = 10$, $Q = \frac{1}{5}\pi$. Estados iniciais contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . (a) $|419\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$. (b) $|31\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$. Forte dependência da dinâmica com o estado inicial. 80
- 4.5 Ondas Estacionárias. $\langle S_j^z \rangle_t$ vs t , $j = 1, 2, \dots, 14$. $N = 14$. XXZ, $J^{(1)} = 1$, $\Delta = 1.0$. Estados iniciais. Superposições de dois estados do tipo $|P_r^\beta\rangle$: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|P_{r_1}^{\beta_1}\rangle + |P_{r_2}^{\beta_2}\rangle)$, (a) $r_1: \mu = I, 1, \beta_1 = 1, r_2: \mu = II, 1; i = 1, \beta_2 = 1$. (b) $r_1: \mu = II, 1; i = 1, \beta_1 = 1, r_2: \mu = II, 1; i = 1, \beta_2 = 100$. Superposições de dois auto-estados: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|r_1 \zeta_1\rangle + |r_2 \zeta_2\rangle)$, (c) $r_1: \mu = I, 1, \zeta_1 = 133, r_2: \mu = II, 1; i = 1, \zeta_2 = 245$. (d) $r_1: \mu = II, 1; i = 1, \zeta_1 = 1, r_2: \mu = II, 1; i = 1, \zeta_2 = 2$ 85
- 4.6 $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t)$ vs t e $\text{Im}(\langle S_Q^z \rangle_t)$ vs t . XXZ, $J^{(1)} = 1$, $N = 14$, $Q = \frac{1}{7}\pi$, $\Delta = 0, 0.1, 0.5, 1.5$. Estados iniciais (4.37): produto direto, coluna da esquerda, estado de superposição, coluna da direita. 90
- 4.7 $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t , XXZ, $J^{(1)} = 1$. $N = 14$, $Q = \frac{1}{7}\pi$, $\Delta = 0, 0.5, 1.0, 1.5$. Dois estados iniciais: um do tipo parede $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow_7\downarrow\downarrow \dots \downarrow_{14}\rangle$ e o outro é uma superposição de estados do tipo parede, (4.38). 94
- 4.8 $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t . XYZ, $\xi_x = 1 + \gamma$, $\xi_y = 1 - \gamma$, $\xi_z = \Delta$, $\gamma = 0.8$, $\Delta = 1.5$. $N = 10$, $Q = 1 \frac{2\pi}{N}$. Estados iniciais: (a) $|419\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$. (b) $|31\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$ 95
- 4.9 $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t . $N = 120$. Hamiltoniano XX, $\Delta = 0$. Subespaço de uma onda de spin. Estados iniciais, $\rho_0(S^z)$ e $|1\rangle$, (4.39). $Q = q \frac{2\pi}{N}$. $q = 41$ e $q = 40$ 97
- 4.10 $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t . XX, $J^{(1)} = 1$, $N = 120$, $|\text{Pa}_{120}^3\rangle$. Relaxação rápida para $Q = \frac{1}{3}\pi$ e usual para $Q = \frac{3}{4}\pi$. O tempo t está em unidades arbitrárias. 98
- 4.11 $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t . XX, $J^{(1)} = 1$. $N = 120$. $Q = \frac{\pi}{3}$. $|W_N^{fa}\rangle$ e $|W_N^{ic}\rangle$ flutuam. O tempo t está em unidades arbitrárias. 98
- 4.12 $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t , XX, $J^{(1)} = 1$. $N = 120$. $Q = \frac{3}{5}\pi$. $|\text{Pa}_{120}^{12}\rangle$. O tempo t está em unidades arbitrárias. 100
- 4.13 $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t , XX, $J^{(1)} = 1$. $N = 120$. $Q = \frac{3}{5}\pi$. $|\text{Pe}_{120}^{12}\rangle$. Há reconstruções quase totais de $\langle S_Q^z \rangle_t$ 100
- 4.14 Curva de Dispersão $E_k^{(1,2)}$ vs k , (2.40). $N = 1200$. $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0, 0.1, 0.25, 0.4, 0.5, 0.8, 1.0, 2.0, 4.0, 5.0, 9.7$ 102
- 4.15 $Q_{(2c)}$ vs $1/J_c^{(2)}$. $N = 1200$. $J^{(1)} = 1$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). 104
- 4.16 Tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial de $\langle S_Q^z \rangle_t$ (4.4) ou (4.50). t_r vs Q . $N = 1200$, $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.4$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). 105
- 4.17 $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t (4.4) ou (4.50), detalhes. $N = 1200$, $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.4$, estado inicial, $|1\rangle$ 106

- 4.18 Ajustes de ν e τ em $\langle S_Q^z \rangle_t$. $N = 1200$, $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.4$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39).
 (a) ν vs Q . (b) $\frac{1}{\tau}$ vs Q 107
- 4.19 Patamar de oscilação de $\langle S_Q^z \rangle_t$ logo antes de manifestar-se a primeira reconstrução parcial da magnetização P_r vs $1/N$. $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.4$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). 107
- 4.20 Relaxação para um estado de equilíbrio caracterizado por magnetização espacialmente não homogênea. $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t . $N = 120$, $\Delta = 1.8$, $J^{(\text{imp})} = 1.9$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). O spin girado do estado inicial está localizado em um sítio que participa da interação de troca da impureza. A impureza é descrita por uma ligação de troca diferente das demais. O tempo t está em unidades arbitrárias. 109
- 4.21 $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 72$, $Q = \frac{5\pi}{6}$. O tempo t está em unidades arbitrárias.
 (a) XX, $\Delta = 0$, $|1, 2\rangle$, $|1, 18\rangle$ ou $|1, 37\rangle$. (b) XXZ, $\Delta = 1$, $|1, 2\rangle$. (c) XX, $\Delta = 0$, $|1\rangle$. (d) XXZ, $\Delta = 1$, $|1, \frac{N}{4} = 18\rangle$. (e) XX, $\Delta = 0$, $|1\rangle$ e $|1, 2\rangle$. (f) XXZ, $\Delta = 1$, $|1, \frac{N}{2} + 1 = 37\rangle$ 111
- 4.22 $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 72$, $Q = \frac{3\pi}{4}$. Estado inicial, $|1, \frac{N}{4} = 18\rangle$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) XX, $\Delta = 0$, (b) XXZ, $\Delta = 1$ 112
- 4.23 R vs t e F vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 4$. Estado inicial, $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) XXX, $\Delta = 1$. (b) XXZ, $\Delta = 1.5$. 114
- 4.24 R vs t e F vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 14$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|r_1 \zeta_1\rangle + |r_2 \zeta_2\rangle)$, $r_1: \mu = I, 1$, $\zeta_1 = 1$; $r_2: \mu = II, 1$, $i = 1$, $\zeta_2 = 1$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) XXX, $\Delta = 1$, $E_{r_1 \zeta_1} = -5.95644382$, $E_{r_2 \zeta_2} = -5.31172108$.
 (b) XXZ, $\Delta = 1.5$, $E_{r_1 \zeta_1} = -7.20400879$, $E_{r_2 \zeta_2} = -6.34682789$ 114
- 4.25 R vs t e F vs t . $N = 240, 120$ e 60 , XX, $\Delta = 0$, $J^{(1)} = 1$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). Subespaço de uma onda de spin. O tempo t está em unidades arbitrárias. 116
- 4.26 R vs t e F vs t , detalhes. $N = 72, 60, 48, 36$. XXZ, $\Delta = 1$, $J^{(1)} = 1$. Estado inicial $|1, 2\rangle$, (4.51), cujos dois spins girados estão em sítios vizinhos. Subespaço de duas ondas de spin. 117
- 4.27 R vs t e F vs t , detalhes. $N = 72, 60, 48, 36$. XXZ, $\Delta = 1$, $J^{(1)} = 1$. Estado inicial $|1, 1 + \frac{N}{2}\rangle$, (4.51), cujos dois spins girados estão separados pela maior distância possível em uma cadeia com CCP. Subespaço de duas ondas de spin. 118
- 4.28 R vs t e F vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 14$, $\Delta = 0, 0.1, 0.5, 1.5$. Estado inicial, $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . R : coluna da esquerda, F : coluna da direita. 119
- 4.29 R vs t e F vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 14$, $\Delta = 0, 0.5, 1, 1.5$. Estado inicial, do tipo parede $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow_7 \downarrow \dots \downarrow_{14}\rangle$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . R : coluna da esquerda, F : coluna da direita. 121

4.30	R vs t e F vs t . $J^{(1)} = 1$, $\Delta = 1$, $N = 10, 14$. Estados iniciais, superposições de produtos diretos do tipo parede (4.38), contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . Dimensões dos subespaços de estados acessíveis à evolução temporal, $\text{Dim}_{N=10} = 27$, $\text{Dim}_{N=14} = 212$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) R , (b) F	122
5.1	Propagação de um ‘sinal’ no subespaço de uma onda. $N = 120$. Estado inicial, $ 1\rangle$ (4.39). $ b_{60}(t) $ vs t , $ b_{61}(t) $ vs t , $\langle S_{j=60}^z \rangle_t$ vs t , $\langle S_{j=61}^z \rangle_t$ vs t , $C_{1,61}$ vs t , $C_{60,61}$ vs t	133
5.2	Sistema pequeno. Dinâmicas reversíveis e periódicas. Estado inicial, $ 1\rangle$ (4.39). $N = 4$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) \overline{C} vs t . ε_N vs t . Q vs t . (b) R vs t . F vs t . L vs t	134
5.3	Saturação das grandezas de emaranhamento em uma cadeia suficientemente grande. $N = 120$. Estado inicial, $ 1\rangle$ (4.39). O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) \overline{C} vs t , ε_N vs t , Q vs t . (b) Q vs t , detalhe.	135
5.4	Coincidências entre dinâmicas de C_T em sistemas com números de sítios diferentes. Estado inicial, $ 1\rangle$ (4.39). C_T vs t . $N = 240, 120$ e 60 . Os tempos de saturação e de coincidência são aproximadamente os mesmos $t_s(N) \approx t_c(N)$. O tempo t está em unidades arbitrárias.	137
5.5	Coincidências entre dinâmicas de $E_{\log_2}(\psi)$, NQ , R , F e L em sistemas com números de sítios diferentes. Estado inicial, $ 1\rangle$ (4.39). $E_{\log_2}(\psi)$ vs t . NQ vs t , detalhe. L vs t , $L(0) = 1$. $N = 240, 120$ e 60 . Os tempos de saturação e de coincidência são aproximadamente os mesmos $t_s(N) \approx t_c(N)$. R vs t e F vs t , estão exibidos na Figura 4.25. O tempo t está em unidades arbitrárias.	138
5.6	Estados iniciais do tipo $ W_N\rangle$ (4.40): um auto-estado $ W_{120}^5\rangle$, $ W_N^{ic}\rangle = W_N^{\sqrt{2}/3}\rangle$, $ W_N^{fa}\rangle$. $N = 120$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) \overline{C} vs t , ε_N vs t . (b) Q vs t	139
5.7	$J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.2, 0.25, 0.3, 0.4$. $N = 1200$. Estado inicial, $ 1\rangle$ (4.39). Coluna da esquerda: R vs t , detalhes. Coluna da direita: F vs t , detalhes. Há uma certa analogia das curvas da fidelidade com as curvas da magnetização, Figura 4.17. O tempo t está em unidades arbitrárias.	141
5.8	Saturação do emaranhamento. $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.4$, $N = 1200$. Estado inicial, $ 1\rangle$ (4.39). (a) \overline{C} vs t , (b) ε_N vs t , (c) Q vs t , detalhe, (d) L vs t	142
5.9	Dependência de t_{s1} com $J^{(2)}$. \overline{C} vs t , $J^{(1)} = 1$, $N = 1200$. Estado inicial, $ 1\rangle$ (4.39). O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) $J^{(2)} = 0.5$, $t_{s1} = 346$, (b) $J^{(2)} = 0.8$, $t_{s1} = 260$. A Figura 5.8 (a) indica $t_{s1} = 390$ para $J^{(2)} = 0.4$	142
B.1	Os oito elementos de simetria do grupo D_4 , associado à uma cadeia com CCP com quatro sítios.	166

Lista de Tabelas

2.1	RI de dimensão <i>Um</i> do grupo D_N	14
2.2	RI de dimensão <i>Dois</i> do grupo D_N	15
2.3	Caracteres dos elementos de D_N no subespaço de autovalor nulo de S^z	17
2.4	Degenerescências: XXZ, CCP, $N = 14$, autovalor nulo de S^z , $\text{Dim} = 3432$	23
2.5	Degenerescências: XXZ, CCP, $N = 10$, autovalor nulo de S^z , $\text{Dim} = 252$	23
2.6	Degenerescências: XXZ, extremidades livres, $N = 10$, autovalor nulo de S^z , $\text{Dim} = 252$	23
2.7	Degenerescências: XX, $\Delta = 0$, impurezas, $N = 10$, autovalor nulo de S^z , $\text{Dim} = 252$	23
3.1	\mathcal{H}_{XY} com CCP nas variáveis de spin.	31
3.2	Espectros nas versões fermiônica e de spin $N = 8$, $XY(\gamma)$, $\gamma = 0.5$	33
3.3	$XY(h, \gamma)$: Mínimos Q_{mv} da curva de dispersão (3.17) e Criticalidades Q_A e Q_B . $N = 1200$	57
3.4	Patamar de oscilação de $\langle S_{\tilde{Q}}^z \rangle_t^{(-)}$ logo antes da primeira reconstrução parcial da magnetização. P_r vs $1/N$. $XY(h, \gamma)$, $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$	60
4.1	Coincidências — $\langle S_{\tilde{Q}}^z \rangle_t$. Versões fermiônicas e de spin.	74
4.2	Estados iniciais escolhidos para a obtenção da Tabela 4.1, no caso de $N = 10$	74
4.3	Regra de Seleção. $N = 10$. Autovalor nulo de S^z	83
4.4	Dimensões de espaços de estados acessíveis a certos estados iniciais.	89
4.5	XXZ, $\Delta \neq 0$: Parcelas de maior peso na somatória (4.29).	92
4.6	Amplitudes $\langle S_{\tilde{Q}}^z \rangle_t$, $ \psi_0\rangle$: Produto Direto.	98
4.7	XX($J^{(2)}$): Mínimos Q_{mv} da curva de dispersão e Criticalidades $Q_{(2c)}$. $N = 1200$	103
4.8	Recorrência e Fidelidade de alguns estados.	113
5.1	Localização com respeito a uma base de auto-estados. $N = 120$	132
B.1	Base dos estados do tipo produto direto para $N = 4$ e autovalor nulo de S^z	165

B.2	Grupo D_4 : Representações Irredutíveis de dimensão um , Tabela 2.1, elementos diagonais da RI de dimensão $dois$, Tabela 2.2. Caracteres da RI de dimensão $dois$. Caracteres da representação redutível de dimensão $seis$ gerada pelo subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z	167
B.3	Operadores de Projeção do grupo D_4	167
B.4	Ação dos operadores do grupo D_4 nos estados do tipo produto direto indicados na Tabela B.1.	168
B.5	Uma base de estados no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , que reflete a simetria do grupo D_4	168
B.6	Autovalores e auto-estados do Hamiltoniano Heisenberg isotrópico, $\Delta = 1$, para $N = 4$ no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z	169
B.7	Autovalores de $S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z$ correspondentes aos estados do tipo produto direto indicados na Tabela B.1.	172

Capítulo 1

Introdução

O objetivo deste trabalho será analisar, através de cálculo numérico, a relaxação do spin em um sistema de muitos corpos. Serão tratados sistemas quânticos de spin $\frac{1}{2}$ de baixa dimensão espacial, desacoplados de graus de liberdade de banhos externos, e com interações dadas por um Hamiltoniano de troca. A dinâmica é originada exclusivamente por flutuações quânticas. Tomam-se estados iniciais arbitrários, sem nenhuma hipótese estabelecendo proximidade com o estado fundamental ou qualquer outro auto-estado do Hamiltoniano. Procura-se identificar processos lentos ou rápidos da relaxação da magnetização e analisar suas conexões com a estrutura do espectro de energia do Hamiltoniano. O ponto de partida para este trabalho é um conjunto de resultados envolvendo famílias do Hamiltoniano XY, para uma certa classe de estados iniciais, onde foram encontrados processos lentos de extinção da magnetização. O objetivo principal neste trabalho será a análise da relaxação da magnetização quando a interação de troca é dada pelo Hamiltoniano de Heisenberg com anisotropia axial, XXZ. As evoluções temporais da magnetização serão comparadas com a recorrência e a fidelidade do estado evoluído no tempo em relação ao estado inicial.

As evoluções de algumas grandezas associadas ao emaranhamento global, a partir de estados contidos no subespaço de uma onda de spin, fornecerão uma compreensão sobre a criação do emaranhamento.

1.1 Sistema Fechado

Com o propósito de se estudar a dinâmica de um sistema movido exclusivamente por flutuações quânticas é relevante focalizar a atenção naqueles sistemas onde os efeitos quânticos manifestam-se com maior intensidade. Isso corresponde a sistemas de baixa dimensão e com o menor spin possível. Os Hamiltonianos dos sistemas unidimensionais são mais fáceis de serem diagonalizados que os sistemas de dimensão superior. Mesmo assim essa tarefa não é simples. Do ponto de vista prático os sistemas

unidimensionais têm atraído atenção a medida que as técnicas apropriadas de síntese de materiais [1], cujas propriedades magnéticas podem ser descritas por esses sistemas, vem sendo desenvolvidas. Neste trabalho serão analisadas as cadeias de spin $\frac{1}{2}$, cujos spins estejam localizados e sem a presença de fônons.

A interação entre os spins é a de troca, a qual originalmente descreve a interação Coulombiana eletrostática entre os elétrons, quando se impõe a condição de simetria sobre a função de onda de um sistema de partículas idênticas interagentes. Para essa interação se define um Hamiltoniano efetivo de spin. O problema em questão é chamado de muitos corpos, porque as interações entre os spins em um sistema com muitos graus de liberdade fazem com que um auto-estado genérico seja superposição de estados contidos em um espaço de Hilbert muito grande. A interação entre os spins modelada por um Hamiltoniano de troca pode ser aplicada a sistemas onde se definem ‘unidades’ interagentes, as quais, admitindo-se certo grau de aproximação, ficam restritas a ocupar cada uma delas poucos estados quânticos, *dois estados* por exemplo. A interação entre essas unidades também pode ser modelada efetivamente por um Hamiltoniano de spin.

Os estados iniciais escolhidos são caracterizados por magnetização espacialmente não homogênea. Não foram feitas hipóteses sobre a proximidade do estado inicial com um estado de equilíbrio. Admite-se que o estado inicial seja gerado por uma forte perturbação externa. No caso de o sistema físico ser uma cadeia de íons magnéticos, por exemplo, a perturbação externa pode ser um campo magnético altamente não homogêneo, o qual é ligado e depois desligado. O sistema poderia também ser retirado do equilíbrio por um forte campo homogêneo, mas o interesse está na dinâmica da não homogeneidade.

A relaxação corresponde ao processo que direciona o sistema ao equilíbrio, a partir do estado inicial fortemente perturbado. Os sistemas infinitos analisados em [2, 3, 4] atingem assintoticamente o equilíbrio no limite de tempo infinito. O equilíbrio é caracterizado por magnetização espacialmente homogênea, quando o Hamiltoniano apresenta simetria de translação. Diferenças importantes entre as dinâmicas dos sistemas finitos e infinitos serão discutidas. Um processo de relaxação pode ser lento ou rápido. O interesse inicial neste trabalho consistia em caracterizarem-se e analisarem-se processos lentos. Apesar de os sistemas analisados neste trabalho serem ordenados, e alguns integráveis, muito diferentes de um vidro de spin, podem emergir processos bastante lentos. Entretanto, obtiveram-se processos rápidos também.

Um sistema pode ser levado ao equilíbrio por interações internas e externas. Neste trabalho se consideram apenas as flutuações quânticas, interações internas e aquelas interações externas que possam ser descritas efetivamente pelas variáveis internas, por exemplo, efeitos do campo cristalino sobre os spins. Fica implícito que a forte perturbação externa é removida logo após a preparação do estado inicial. A partir de então o sistema permanece indefinidamente fechado. Não há contato com variáveis externas sobre as quais não se tem controle, como por exemplo, variáveis de um banho. O Hamiltoniano é independente do tempo, e o sistema conserva energia, não é dissipativo. Não há flutuações térmicas.

As flutuações quânticas têm sua origem no Princípio da Incerteza. No sistema de spins o Princípio

da Incerteza é expresso pela não comutatividade das componentes do operador de spin,

$$[S^\alpha, S^\beta] = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S^\gamma. \quad (1.1)$$

Se o Hamiltoniano envolver mais de uma componente do spin, surgirá a dinâmica quântica. Um auto-estado de S^z , por exemplo, não é auto-estado de S^y e vice versa. O termo do Hamiltoniano que envolve S^y irá fazer evoluir o auto-estado de S^z e vice versa. O spin ficará permanentemente girando, ‘*spin flip*’, mesmo que o sistema esteja em um auto-estado do Hamiltoniano. Um modelo de spin que não apresenta flutuações quânticas é o de Ising sem campo transversal, pois ele envolve apenas uma componente do spin.

As flutuações quânticas promovem o transporte do valor médio da magnetização de um sítio para outro. Não há necessidade de haver transporte das partículas portadoras do spin de um sítio para outro para haver transporte do valor médio da magnetização.

1.2 Dinâmica de Não Equilíbrio

Para se obter uma dinâmica não trivial, o estado inicial precisa envolver dois ou mais auto-estados não degenerados. Tal estado não tem energia definida, porém a ele associa-se um valor médio da energia, o qual permanece constante durante sua evolução temporal. Se o estado inicial for puro e descrito por uma superposição de auto-estados, a equação de Schrödinger, com Hamiltoniano Hermitiano usual, prescreve que o estado evoluído será indefinidamente uma superposição coerente dos mesmos auto-estados. Isso significa que o sistema não transicionará para nenhum auto-estado particular, por exemplo, para o estado fundamental.

Fica evidente uma característica importante do cálculo deste tipo de problema de não equilíbrio. As propriedades dinâmicas analisadas neste problema não necessariamente se restringem às propriedades do estado fundamental e dos estados excitados logo acima dele. Elas envolvem estados distribuídos por todo o espectro. Dependendo do estado inicial, a dinâmica pode envolver o espectro completo, frações significativas dele, ou poucos estados.

Outra característica importante deste cálculo é uma grande insensibilidade da dinâmica, quer o acoplamento entre os spins seja ferromagnético, quer seja antiferromagnético. Para um grande conjunto de estados iniciais a dinâmica é totalmente independente do sinal da constante de troca. O papel inexistente ou secundário do sinal da constante de troca está ligado ao fato de a dinâmica envolver auto-estados do Hamiltoniano, que não necessariamente estejam próximos do estado fundamental. O ordenamento do estado fundamental não é relevante neste problema.

O estado de equilíbrio é uma superposição dos mesmos auto-estados do pacote inicial, porém com fases diferentes. Não ocorre um fenômeno de decoerência que resulte em perda de fase entre os auto-estados, uma vez que o sistema não está acoplado às variáveis de ambiente. Ocorre uma defasagem dos auto-estados, a qual promove interferência destrutiva no valor médio da magnetização.

1.3 Problema Específico

A motivação para este projeto de pesquisa proveio de trabalhos anteriores [2, 3, 4], tratando o problema da relaxação da magnetização quando as interações de troca entre os spins são dadas por Hamiltonianos da família XY. As duas características marcantes referentes à relaxação da magnetização movida pelos Hamiltonianos da família XY, a partir de estados $\rho_0(S^\alpha)$, encontradas nos trabalhos citados foram: a relaxação oscilatória e amortecida por uma lei de potência e uma criticalidade na lei de potência que pode surgir dependendo de parâmetros do Hamiltoniano. Naqueles sistemas a criticalidade está associada à presença de um *gap* de energia entre o estado fundamental e o primeiro excitado, além de *nesting* na curva de dispersão. Essa conexão havia sido conjecturada como sendo universal para sistemas de uma dimensão que tenham *gap* no espectro. Este trabalho constituirá um teste a essa conjectura.

O objetivo original proposto neste trabalho consiste em se procurar, através de cálculo exato, a existência de processos ‘muito lentos’ da relaxação da magnetização em cadeias de spins $\frac{1}{2}$ modeladas pela interação de troca de Heisenberg com anisotropia axial, XXZ, e relacioná-los com a estrutura do espectro de energia do Hamiltoniano.

Quando a dinâmica é iniciada a partir de estados arbitrários, há necessidade de se conhecer todos os auto-estados e autovalores do Hamiltoniano, ou de frações apreciáveis. Isso constitui uma grande dificuldade para o cálculo dos valores médios considerados, porque a dimensão do espaço completo de estados do Hamiltoniano quântico de spins $\frac{1}{2}$ cresce muito rapidamente com o número de sítios do sistema, 2^N . Esse número é excessivamente grande, por exemplo, para $N = 80$ é maior que o número de Avogadro.

A solução analítica exata para o Hamiltoniano de Heisenberg de spin $\frac{1}{2}$ XXZ, conhecida como Ansatz de Bethe, exprime os auto-estados através de exponenciais cujos argumentos envolvem números fatoriais de parcelas. Por meio dos auto-estados assim expressos, não se calculam de maneira simples valores médios de operadores. Além disso, essa solução analítica não é apropriada para fornecer certos tipos de auto-estados [5]. Optou-se pelo tratamento numérico neste trabalho. É possível obter qualquer auto-estado através de solução numérica, porém, há limitações impostas pelo número de sítios do sistema. Para o Hamiltoniano XXZ, a diagonalização e o cálculo dos valores médios da magnetização ficaram limitados a cadeias com 14 sítios quando se tratou o subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , cuja dimensão é o número combinatório $(N \ N/2) = N!/(N/2)!(N/2)!$, por outro lado atingiram cadeias com 1200 sítios no subespaço de uma onda de spin, cuja dimensão é N . O Hamiltoniano XXZ pode ou não apresentar um *gap* no espectro de energia do subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z dependendo da anisotropia, mas não apresenta *gap* no espectro de energia do subespaço de uma onda de spin. Nesse subespaço foram determinadas curvas de dispersão a fim de se identificar *nesting*. Para auxiliar o entendimento sobre a relaxação da magnetização foram analisadas duas relações entre o estado evoluído no tempo e o estado inicial: a recorrência e a fidelidade.

Finalmente, algumas grandezas associadas ao emaranhamento de estados quânticos foram analisadas,

em particular para estados contidos no subespaço de uma onda de spin, onde há expressões simples para aquelas grandezas. Foram comparadas as evoluções de tais grandezas associadas ao emaranhamento com a recorrência, a fidelidade e a magnetização.

No Capítulo 2 será apresentada uma abordagem numérica para a diagonalização do Hamiltoniano XXZ. Foram gerados estados caracterizados pelas simetrias espaciais da cadeia de spins através dos Operadores de Projeção associados às Representações Irredutíveis de um grupo de simetria espacial que comuta com o Hamiltoniano.

No Capítulo 3 serão analisadas as soluções analíticas da evolução da magnetização para sistemas finitos, referentes aos Hamiltonianos planares com anisotropia na interação de troca, com e sem campo transversal, $XY(h, \gamma)$ e $XY(\gamma)$, as quais foram desenvolvidas na dissertação de Tygel [4]. Para o Hamiltoniano $XY(\gamma)$ será mostrado como a relaxação e a criticalidade dos sistemas infinitos são compatíveis com as marcas das criticalidades presentes nos sistemas finitos. Para o Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$ serão caracterizadas as marcas da criticalidades presentes nos sistemas finitos.

No Capítulo 4 será calculada numericamente a evolução da magnetização para o Hamiltoniano XXZ, separadamente no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z e nos subespaços de uma onda e de duas ondas de spin. No subespaço de uma onda introduziram-se separadamente interações entre segundos vizinhos e impurezas na cadeia de spins. Nos três subespaços serão calculadas a recorrência e a fidelidade.

No Capítulo 5 serão apresentados os cálculos referentes ao emaranhamento, no subespaço de uma onda de spin. Finalmente, no Capítulo 6 serão apresentados um resumo dos resultados obtidos e as conclusões.

1.4 Parte da Informação

O estudo da evolução temporal da magnetização não esgota o problema da relaxação. Em princípio toda informação disponível sobre um sistema quântico está contida no seu espectro completo de auto-estados e autovalores. Porém, mesmo conhecendo-os, o que já não é uma tarefa simples, a compreensão sobre o sistema e suas propriedades não emerge de maneira evidente ou imediata. A informação precisa ser representada em uma forma compreensível ao entendimento das propriedades do sistema analisado.

Uma possível maneira de analisar-se a dinâmica de um sistema de spins, consiste no cálculo de médias de funções de correlação,

$$\langle S_Q^\alpha(t) S_{Q'}^{\alpha'}(t') \rangle \quad (1.2)$$

como se faz na Teoria de Resposta Linear [6], onde a função de correlação é calculada no equilíbrio térmico. Essa abordagem está conectada a problemas experimentais, e fornece informações, por exemplo, sobre seção de choque de espalhamento de neutrons [7] e tempo de relaxação spin rede, T_1 , definido em ressonância nuclear magnética [8]. Poder-se-ia pensar ainda em se calcular funções de correlação de ordem superior.

Em contraste com a Teoria de Resposta Linear, neste trabalho se obteve parte da informação do sistema físico, desacoplado de banhos térmicos, calculando-se médias de operadores associados à magnetização, em estados arbitrários. É um ponto de vista diferente para um problema dinâmico diferente. A dinâmica de não equilíbrio em sistemas de spin fechados já tem sido considerada através do cálculo da magnetização [9], e de funções de correlação, onde se encontrou envelhecimento quântico [10, 11].

Capítulo 2

Diagonalização Numérica

Para se tratar o problema dinâmico deste trabalho é necessário obter o espectro completo de auto-estados e autovalores do Hamiltoniano, ou frações significativas do espectro. A possibilidade de se restringir a dinâmica às frações do espectro depende de ambas, a simetria do Hamiltoniano e a simetria do estado inicial. Explorar a simetria do Hamiltoniano, além de contribuir para se restringir a dinâmica a uma fração do espectro, facilita também o processo de diagonalização, permitindo que cadeias com maior número de sítios sejam tratadas. Neste Capítulo será desenvolvido o processo de diagonalização numérica para cadeias de spin $\frac{1}{2}$ com e sem impurezas e com e sem acoplamentos entre segundos vizinhos. Fez-se uso das simetrias no espaço de spin e, na ausência de impurezas, no espaço de coordenadas espaciais. A simetria no espaço de coordenadas espaciais será feita através do formalismo da Teoria de Representação de Grupo, utilizando os Operadores de Projeção do grupo espacial do Hamiltoniano, D_N , o que permite construir-se matrizes reais do Hamiltoniano.

2.1 Simetrias do Problema

As operações de simetria podem estar associadas a coordenadas espaciais e a coordenadas de spin. Ao se estudar um Hamiltoniano de spin, as coordenadas espaciais em questão são simplesmente as coordenadas espaciais que localizam as partículas na rede. As coordenadas espaciais da função de onda que descreve as partículas não serão consideradas explicitamente. O Hamiltoniano de spin descreve efetivamente a interação Coulombiana eletrostática em termos dos graus de liberdade de spin, apesar de a interação Coulombiana ter sua origem nas coordenadas espaciais. A diagonalização implementada neste trabalho seguiu duas estratégias. Na primeira foi utilizada apenas a simetria no espaço de spin para se criar a base de estados. Na segunda estratégia utilizaram-se as simetrias espaciais discretas de maneira complementar. Uma terceira etapa consistiu na tentativa do uso da simetria de inversão do spin.

2.1.1 Simetrias nas Coordenadas de Spin

Um sistema simples de partículas não interagentes é invariante sob rotações ao redor de qualquer direção no espaço de spin, feitas independentemente em cada partícula. Ao introduzirem-se interações entre as partículas, a simetria do sistema cai e depende da forma do Hamiltoniano que descreve tais interações. Seja o Hamiltoniano descrito pelo modelo de Heisenberg,

$$\mathcal{H}_{XYZ} = J^{(1)} \sum_{i=1}^N (\xi_x S_i^x S_{i+1}^x + \xi_y S_i^y S_{i+1}^y + \xi_z S_i^z S_{i+1}^z), \quad (2.1)$$

onde o índice de sítio $N + 1$ deve ser entendido como sendo 1. ξ_x , ξ_y e ξ_z são parâmetros de anisotropia da integral de troca. A variação de apenas dois desses parâmetros é suficiente para se obter qualquer anisotropia, a menos de um fator de escala. Variando-se os três parâmetros obtém-se qualquer anisotropia com qualquer fator de escala.

O caso de interação isotrópica corresponde a

$$\xi_x = \xi_y = \xi_z, \quad (2.2)$$

onde o Hamiltoniano comuta com o operador do spin total,

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{XXX}, \mathbf{S}] &= 0, \\ \mathbf{S} &= \sum_{j=1}^N \mathbf{S}_j, \end{aligned} \quad (2.3)$$

o que equivale a dizer que é invariante sob rotações ao redor de qualquer direção no espaço de spin. Porém, a rotação deve ser aplicada à função de onda de todo o sistema, ao invés de o ser a cada partícula separadamente.

O caso de maior interesse neste trabalho é aquele cujo Hamiltoniano tem anisotropia axial na constante de troca, caracterizada por uma componente da interação de troca diferente das outras duas, por exemplo, a componente z ,

$$\xi_x = \xi_y \neq \xi_z. \quad (2.4)$$

Assim, o Hamiltoniano tem simetria de rotação axial, e comuta apenas com uma componente do operador do spin total,

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{XZX}, S^z] &= 0, \\ S^z &= \sum_{j=1}^N S_j^z. \end{aligned} \quad (2.5)$$

O interesse no estudo da evolução temporal da magnetização para o Hamiltoniano \mathcal{H}_{XZX} , com anisotropia axial, advém do fato de o mesmo apresentar ou não um *gap* de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, variando-se o parâmetro de anisotropia. Seja o parâmetro de anisotropia axial definido por,

$$\Delta = \frac{\xi_z}{\xi_x}, \quad \text{com } \xi_x = \xi_y, \quad (2.6)$$

então,

$$\begin{aligned} &\text{para } |\Delta| > 1, \text{ há } gap \\ &\text{para } |\Delta| \leq 1, \text{ não há } gap. \end{aligned} \tag{2.7}$$

A segunda desigualdade diz que o Hamiltoniano isotrópico \mathcal{H}_{XXX} , $\Delta = 1$, não possui o *gap* mencionado.

O caso mais difícil de se tratar é aquele correspondente à interação de troca totalmente anisotrópica, caracterizada por todas componentes diferentes umas das outras,

$$\xi_x \neq \xi_y \neq \xi_z \neq \xi_x, \tag{2.8}$$

cujo Hamiltoniano comuta com um operador muito particular, \mathcal{L} , no caso específico de spin $\frac{1}{2}$,

$$[\mathcal{H}_{XYZ}, \mathcal{L}] = 0, \tag{2.9}$$

onde [12],

$$\mathcal{L} = e^{i\pi(S^z + \frac{N}{2})}. \tag{2.10}$$

A análise do Hamiltoniano \mathcal{H}_{XYZ} não constitui o objetivo principal deste trabalho. Concentrou-se atenção no caso de anisotropia axial \mathcal{H}_{XXZ} . De qualquer maneira, também foram realizados cálculos para o Hamiltoniano \mathcal{H}_{XYZ} , os quais permitiram a realização de testes de consistência, seções 2.3.1 e 4.2.3, bem como comparações entre os processos de diagonalização numérico e analítico para o limite planar \mathcal{H}_{XY} , Tabela 3.2.

Base de Auto-estados de S_j^z

O espaço de estados de um sistema com N spins $\frac{1}{2}$ tem dimensão 2^N . Essa dimensão decorre do fato de cada partícula ter dois graus de liberdade, associados aos dois auto-estados da partícula de spin $\frac{1}{2}$. Uma base comum aos operadores S^z , \mathcal{L} e S_j^z é constituída por estado do tipo (A.3), ver no Apêndice A. O sistema a ser tratado é finito e com um número par de sítios. O número de sítios é par para não haver frustração no alinhamento dos spins nos estados antiferromagnéticos. Os estados antiferromagnéticos em geral estarão presentes na dinâmica da magnetização quer o acoplamento entre os spins seja ferro ou antiferromagnético, porque a dinâmica envolve estados distribuídos por todo o espectro. O objetivo deste trabalho consiste em inferir o comportamento de sistemas infinitos, a partir de sistemas finitos suficientemente grandes, onde o efeito de frustração não esteja presente.

2.1.2 Simetrias nas Coordenadas Espaciais

As simetrias espaciais de permutação de coordenadas espaciais das partículas dependem dos acoplamentos das constantes de troca entre os sítios. No caso do sistema simples de partículas não interagentes, qualquer permutação de coordenadas deixa o sistema invariante. Há $N!$ permutações possíveis.

$$\mathcal{G}_{nI}^E = S_N, \tag{2.11}$$

onde S_N é o grupo discreto das permutações de N objetos.

Ao introduzirem-se interações entre as partículas, de maneira que cada uma não interaja da mesma maneira com todas as demais, diminui o número de operações de simetria que deixam o Hamiltoniano do sistema invariante. Contudo, se houver homogeneidade nos acoplamentos restarão algumas operações de simetria, por exemplo, havendo interações entre primeiros vizinhos e condições de contorno periódicas, CCP, onde os índices L e $N + L$ dos operadores de spin em uma cadeia com N sítios estão associados ao mesmo sítio. As operações de simetria espaciais desse Hamiltoniano podem ser descritas equivalentemente pelos grupos,

$$\mathcal{G}_{CCP}^E = D_N \text{ ou } \mathcal{C}_{Nv}, \quad (2.12)$$

onde D_N é o grupo dihédrico formado apenas por rotações puras, e \mathcal{C}_{Nv} é um grupo formado por rotações e reflexões. Ambos são isomorfos, pois têm mesmo número de elementos de simetria, $2N$, que sempre podem ser colocados em correspondência biunívoca, satisfazendo a mesma tabela de multiplicação.

Descrição do grupo D_N

Um sistema unidimensional infinito com interações homogêneas entre primeiros vizinhos ao longo de toda a rede apresenta simetria de translação. Todos os sítios podem ser transladados de maneira conjunta, por uma distância correspondente a qualquer múltiplo inteiro do parâmetro de rede, e o Hamiltoniano fica invariante. O sistema finito com a simetria de translação análoga precisa ter condições de contorno periódicas. Essa simetria de translação pode ser encarada como uma rotação, imaginando-se que a cadeia está disposta na forma de um anel, Figura 2.1. As rotações equivalentes às translações do sistema infinito são definidas por um eixo de simetria de ordem N , o de mais alta simetria, perpendicular ao plano definido pelo anel. As rotações associadas ao eixo de mais alta simetria serão simbolizadas por $C_N, C_N^2, \dots, C_N^{N-1}$. Os elementos de um grupo que correspondem a operações geométricas equivalentes formam uma *classe conjugada*. A classe onde está certo elemento A de um grupo finito \mathcal{G} é formada por todos os elementos distintos resultantes dos produtos $R^{-1}AR, \forall R \in \mathcal{G}$. Para N par, a rotação $C_N^{\frac{N}{2}}$ constitui uma classe. As rotações restantes constituem $\frac{N}{2} - 1$ classes com dois elementos cada uma. A operação identidade simbolizada por E , a qual deixa inalteradas as posições de todas as partículas, constitui outra classe. Há N eixos de ordem dois perpendiculares ao eixo de maior simetria. Para N par, as rotações associadas a esses eixos estão repartidas em duas classes com $\frac{N}{2}$ elementos cada uma. As operações associadas aos eixos de uma das classes, simbolizados por $U_1, U_2, \dots, U_{\frac{N}{2}}$, trocam as posições de $\frac{N}{2}$ pares de partículas. Esses eixos serão referidos como *eixos mediatrizes*. Os eixos da outra classe, simbolizados por $U'_1, U'_2, \dots, U'_{\frac{N}{2}}$, trocam as posições de $\frac{N}{2} - 1$ pares de partículas e deixam inalteradas as posições de duas partículas. Esses eixos serão referidos como *eixos bissetores*. Ver a Figura 2.1 com o esquema de atuação de algumas operações de simetria sobre a cadeia de spins. Há um total de $\frac{N}{2} + 3$

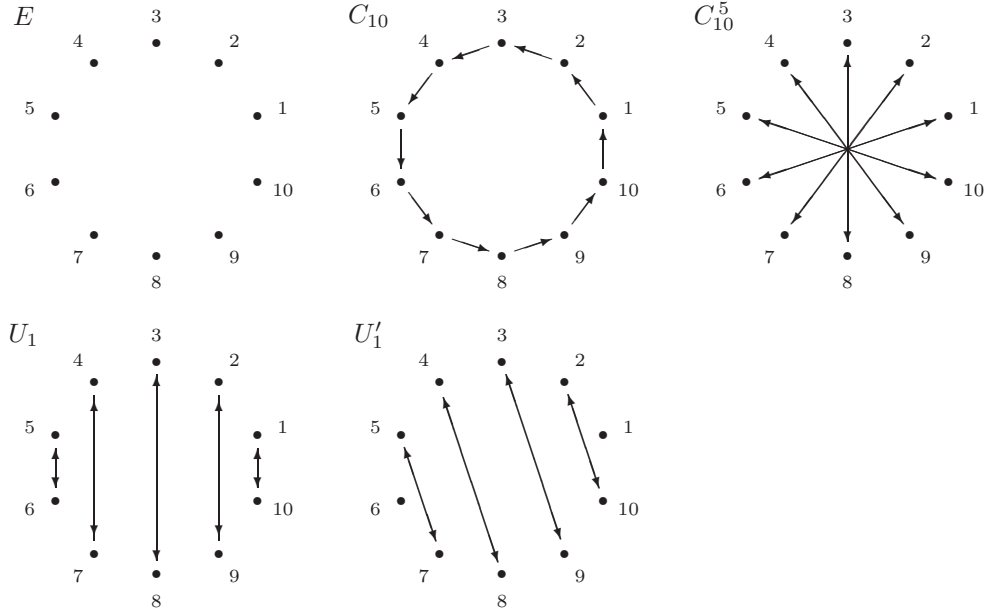


Figura 2.1: Identidade: E . Rotações: C_{10} e C_{10}^5 , ao redor do eixo de mais alta simetria, U_1 ao redor de um eixo mediatriz, U_1' ao redor de um eixo bissetor.

classes. O grupo \mathcal{C}_{Nv} difere do grupo D_N na descrição das operações correspondentes aos eixos de ordem dois, U_i e U_i' . No grupo \mathcal{C}_{Nv} esses eixos são substituídos por planos de reflexão que interceptam-se no eixo de alta simetria. Contudo, uma vez que uma operação de reflexão não é uma operação física de um objeto verdadeiro, optou-se pela nomenclatura do grupo D_N .

2.2 Construção das Bases

Há três tipos de bases de estados a serem construídas neste trabalho. O tipo de base mais simples contém apenas estados como (A.3), os quais são produtos diretos de auto-estados dos operadores S_j^z . O segundo tipo de base será construído a partir de combinações lineares dos estados do tipo produto direto e refletem a simetria espacial do Hamiltoniano. O terceiro tipo de base de estados são os auto-estados, os quais formam uma base onde o Hamiltoniano fica na forma diagonal.

A seguir serão apresentados os detalhes da construção do segundo tipo de base de estados através dos Operadores de Projeção do Grupo D_N . Essa base será usada para se tratar o Hamiltoniano XXZ. Os Operadores de Projeção serão gerados por elementos do grupo expressos em termos de permutações, e por Representações Irredutíveis do grupo expressas por matrizes reais.

2.2.1 Elementos do Grupo em Termos de Ciclos de Permutações

Todo grupo finito é isomorfo a um grupo de permutações de N elementos, S_N , ou a algum de seus subgrupos. Há pelo menos uma maneira de se associar um elemento do grupo finito dado a algum elemento do grupo das permutações. Essa associação é necessária para se operar um elemento de simetria sobre um estado do tipo (A.3). Os elementos do grupo das permutações podem ser representados em duas formas, a chamada representação matricial e a forma de ciclos. Por exemplo, para a operação U_1 indicada na Figura 2.1,

$$P(U_1) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 10 & 9 & 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = (1\ 10)(2\ 9)(3\ 8)(4\ 7)(5\ 6). \quad (2.13)$$

Os índices das permutações referem-se aos sítios da cadeia. As permutações referentes às rotações ao redor do eixo de maior simetria são geradas facilmente na forma matricial. As $\frac{N}{2}$ permutações referentes aos eixos U_i são obtidas de acordo com a seguinte estratégia. Seja uma permutação possível, por exemplo, a permutação (2.13). As $\frac{N}{2} - 1$ permutações restantes pertencentes a mesma classe são obtidas através da definição de classe,

$$P(U_{i+1}) = P(C_N^i)^{-1} P(U_1) P(C_N^i), \quad i = 1, \dots, \frac{N}{2} - 1. \quad (2.14)$$

As $\frac{N}{2}$ permutações referentes aos eixos U'_i , são obtidas através de,

$$P(U'_i) = P(U_i) P(C_N), \quad i = 1, \dots, \frac{N}{2}. \quad (2.15)$$

Os produtos de permutações descritos acima são feitos de maneira elementar, quando as permutações estão escritas na forma matricial. Porém, um algoritmo que efetue uma permutação em um estado de spin (A.3), requer que a referida permutação seja expressa na forma de ciclos. Um algoritmo foi implementado para traduzir todas as permutações da forma matricial para a de ciclos, o qual funciona para qualquer N par.

2.2.2 Representações Irredutíveis do grupo D_N

Dentro da Teoria de Representação de Grupos definem-se as Representações Irredutíveis dos grupos e os Operadores de Projeção associados às RI [13]. Os operadores de projeção serão tratados na seção 2.2.4. Nesta seção serão determinadas todas as Representações Irredutíveis do grupo D_N , expressando-as exclusivamente por meio de matrizes unitárias e reais. Todas as RI de um grupo finito podem ser expressas por matrizes unitárias. Porém, nem todo grupo pode ter todas as suas RI expressas por matrizes reais. Por exemplo o grupo¹ abeliano C_N formado apenas por produtos das rotações C_N não

¹Não se deve confundir as notações do grupo C_N e do elemento de simetria C_N .

apresenta todas as suas RI expressas por números reais. A fim de obterem-se todas as RI² expressas por números reais é necessário que o grupo de simetria contenha simultaneamente as rotações do tipo C_N e dos tipos U_i e U'_i , como por exemplo, aquelas indicadas na Figura 2.1.

Inicialmente, serão calculadas as dimensões das RI do grupo, o que requer dois teoremas. Um teorema diz que o número de RI é igual ao número de classes. O outro diz que a soma dos quadrados das dimensões das RI é igual à *ordem do grupo*, g , que é o número de elementos do grupo,

$$\sum_{\mu}^{\#RI} n_{\mu}^2 = g. \quad (2.16)$$

Admitindo-se que o grupo D_N tenha apenas RI de dimensões $n_{\mu} = 1$ e $n_{\mu} = 2$, totalizando \mathcal{N}_1 e \mathcal{N}_2 representações respectivamente, encontra-se uma única solução para \mathcal{N}_1 e \mathcal{N}_2 compatível com os dois teoremas. A ordem do grupo D_N é $g = 2N$. O número de classes é $\frac{N}{2} + 3$, quando N é par. Então,

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_1 + \mathcal{N}_2 &= \frac{N}{2} + 3, \\ \mathcal{N}_1 \cdot 1^2 + \mathcal{N}_2 \cdot 2^2 &= 2N, \end{aligned} \quad (2.17)$$

donde,

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_1 &= 4, \\ \mathcal{N}_2 &= \frac{N}{2} - 1. \end{aligned} \quad (2.18)$$

A partir das matrizes que representam os *geradores* do grupo, obtém-se as matrizes associadas aos demais operadores do grupo, através de sucessivas multiplicações. O grupo D_N tem dois geradores. A escolha dos geradores não é única, por exemplo, uma possibilidade consiste em C_N e U_1 .

Representações Irredutíveis de Dimensão *Um* do grupo D_N

Uma das RI de dimensão *um* é a representação trivial onde todos os elementos são representados por +1. As outras três RI de dimensão *um* foram obtidas atribuindo-se valores +1 e -1 aos geradores C_N e U_1 . Essa tentativa foi verificada correta pelo teste de ortogonalidade entre as RI. Essas representações não são complexas. Uma vez que a matriz de dimensão *um* é o próprio *character*, ou traço, e o *character* de elementos da mesma classe são iguais, os elementos da mesma classe têm a mesma representação, Tabela 2.1.

Representações Irredutíveis de Dimensão *Dois* do grupo D_N

As Representações Irredutíveis de dimensão *dois* foram obtidas com a finalidade de se conhecer seus elementos de matriz diagonais. Os elementos de matriz com índices *ii* estão associados ao *i*-ésimo projetor da correspondente RI.

²Neste trabalho toda menção a RI distintas deve ser entendida como tratando-se de RI não equivalentes. RI equivalentes: (A.6).

Tabela 2.1: RI de dimensão Um do grupo D_N .

	E	$C_N^{\frac{N}{2}}$	$C_N(2)$	$C_N^2(2)$	\dots	$C_N^{\frac{N}{2}-1}(2)$	$U_i(\frac{N}{2})$	$U'_i(\frac{N}{2})$
$\Gamma^{I,1}$	1	1	1	1	\dots	1	1	1
$\Gamma^{I,2}$	1	1	1	1	\dots	1	-1	-1
$\Gamma^{I,3}$	1	$(-1)^{\frac{N}{2}}$	-1	1	\dots	1	1	-1
$\Gamma^{I,4}$	1	$(-1)^{\frac{N}{2}}$	-1	1	\dots	1	-1	1

As rotações ao redor do eixo de mais alta simetria são representadas por matrizes usuais de rotação expressas em termos das coordenadas de um plano ortogonal àquele eixo de rotação. As matrizes que representam C_N^p são obtidas através de produtos da matriz de C_N . As matrizes que representam as rotações em torno dos eixos de ordem *dois* U_i e U'_i expressas em termos das coordenadas do plano que contém esses eixos são obtidas de maneira diferente para cada uma das duas classes. Para uma dessas duas classes, a dos U_i por exemplo, associa-se a matriz $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ a um de seus elementos, U_1 . As $\frac{N}{2} - 1$ demais matrizes que representam as rotações da classe dos U_i são obtidas através da definição de classe,

$$\Gamma(U_{p+1}) = \Gamma((C_N^p)^{-1}) \Gamma(U_1) \Gamma(C_N^p), \quad p = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} - 1. \quad (2.19)$$

As matrizes que representam a classe dos U'_i são obtidas a partir das matrizes das rotações U_i e da rotação C_N ,

$$\Gamma(U'_p) = \Gamma(U_p) \Gamma(C_N), \quad p = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}. \quad (2.20)$$

As expressões (2.19) e (2.20) são análogas às expressões (2.14) e (2.15). Seguindo o procedimento delineado, obtém-se o conjunto das RI de dimensão *dois* do grupo D_N , Tabela 2.2.

A escolha de funções de base (A.8) associadas a uma RI não é única, há infinitos conjuntos de funções de base equivalentes. A escolha mais conhecida para as funções de base do grupo D_N são as funções harmônicas esféricas. Porém, essas funções geram matrizes complexas para as RI.

As funções de base associadas às representações bidimensionais da Tabela 2.2 são reais. Por exemplo, para $\mu = 1, 2, 3$, uma rotação ao redor do eixo de maior simetria tem a forma,

Tabela 2.2: RI de dimensão *Dois* do grupo D_N .

O índice μ identifica as RI e o índice p identifica os elementos do grupo. $\mu = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} - 1$.

$$\begin{aligned} \Gamma^{\text{II}, \mu}(E) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \\ \Gamma^{\text{II}, \mu}(C_N^p) &= \begin{bmatrix} \cos(\mu p \frac{2\pi}{N}) & -\text{sen}(\mu p \frac{2\pi}{N}) \\ \text{sen}(\mu p \frac{2\pi}{N}) & \cos(\mu p \frac{2\pi}{N}) \end{bmatrix}, & p = 1, 2, \dots, N-1, \\ \Gamma^{\text{II}, \mu}(U_p) &= \begin{bmatrix} \cos(2\mu p \frac{2\pi}{N}) & -\text{sen}(2\mu p \frac{2\pi}{N}) \\ -\text{sen}(2\mu p \frac{2\pi}{N}) & -\cos(2\mu p \frac{2\pi}{N}) \end{bmatrix}, & p = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}, \\ \Gamma^{\text{II}, \mu}(U'_p) &= \begin{bmatrix} \cos(\mu(2p+1)\frac{2\pi}{N}) & -\text{sen}(\mu(2p+1)\frac{2\pi}{N}) \\ -\text{sen}(\mu(2p+1)\frac{2\pi}{N}) & -\cos(\mu(2p+1)\frac{2\pi}{N}) \end{bmatrix}, & p = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos(\phi) & -\text{sen}(\phi) \\ \text{sen}(\phi) & \cos(\phi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, & \mu = 1, \\ \begin{bmatrix} x'^2 - y'^2 \\ 2x'y' \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos(2\phi) & -\text{sen}(2\phi) \\ \text{sen}(2\phi) & \cos(2\phi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^2 - y^2 \\ 2xy \end{bmatrix}, & \mu = 2, \\ \begin{bmatrix} x'^3 - 3x'y'^2 \\ 3x'^2y' - y'^3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos(3\phi) & -\text{sen}(3\phi) \\ \text{sen}(3\phi) & \cos(3\phi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^3 - 3xy^2 \\ 3x^2y - y^3 \end{bmatrix}, & \mu = 3, \\ & x = \cos \phi, y = \text{sen} \phi. \end{aligned} \tag{2.21}$$

A forma das transformações de coordenadas (2.21) serviu de inspiração para obterem-se as RI de dimensão *dois*, Tabela 2.2. A generalização das transformações (2.21) para potências arbitrárias, qualquer μ , foi tomada como hipótese.

2.2.3 Dimensões de Subespaços

A dimensão de um subespaço cujos estados são definidos por um autovalor de S^z e que se transformam segundo uma função da base associada a uma certa coluna de uma RI do grupo espacial, pode ser encontrada de duas maneiras. Uma maneira consiste na construção de uma base ortogonal para tal subespaço. De fato, isso será feito na próxima seção, 2.2.4.

Outra maneira de se encontrar a dimensão de tal subespaço prescinde da construção de uma base. Isso permite a verificação das dimensões das bases ortogonais a serem construídas na próxima seção. A dimensão de cada subespaço formado por estados caracterizados pela simetria de uma RI unidimensional ou por estados caracterizados pela simetria de uma função de base de uma RI de dimensão maior que um é igual ao número de vezes que a correspondente RI aparece na decomposição de $\Gamma^{(z)}$. $\Gamma^{(z)}$ é uma representação do subespaço definido por um autovalor de S^z , e é redutível em termos das RI do grupo espacial \mathcal{G}^E (2.12). Essa decomposição, obtida através do chamado Teorema da Ortogonalidade, é expressa por,

$$a_\mu = \frac{1}{g} \sum_R \chi^{(\mu)*}(R) \chi^{(z)}(R). \quad (2.22)$$

A somatória é feita sobre todos os g elementos do grupo. $\chi^{(\mu)}(R) = \sum_i \Gamma_{ii}^{(\mu)}(R)$ é o caracter de $\Gamma^{(\mu)}(R)$, $\chi^{(z)}(R)$ é o caracter de $\Gamma^{(z)}(R)$; a_μ é o número de vezes que a representação $\Gamma^{(\mu)}$ está contida na representação $\Gamma^{(z)}$, ou seja, a dimensão procurada para o subespaço de interesse.

O cálculo dos caracteres $\chi^{(z)}(R)$ requer o conhecimento de uma base para o subespaço associado ao autovalor de S^z . Os caracteres são independentes da escolha particular da base. Uma possível escolha da base de S^z é aquela constituída de estados resultantes de produtos diretos de auto-estados de spin em cada sítio, da forma (A.3). Esses estados serão simbolizados por $|M_l\rangle$. O caracter $\chi^{(z)}(R)$ é simplesmente igual ao número de estados $|M_l\rangle$ invariantes sob a ação de R .

$$\chi^{(z)}(R) = \sum_{l=1}^{\dim \text{ base } S^z} \langle M_l | R | M_l \rangle. \quad (2.23)$$

Isso decorre do fato de cada elemento diagonal da matriz $\Gamma^{(z)}(R)$, escrita na base dos estados $|M_l\rangle$, ser igual a um ou $zero$ conforme o correspondente estado da base seja ou não invariante sob a ação de R . Por exemplo, para a operação associada ao *eixo bissetor* $U'_1 = (1)(6)(2 \ 10)(3 \ 9)(4 \ 8)(5 \ 7)$, Figura 2.1, da cadeia com 10 sítios, há estados invariantes como $|M_{i_a}\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$ e não invariantes como $|M_{i_b}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$,

$$\begin{aligned} \Gamma^{(z)}_{i_a i_a}(U'_1) &= \langle \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow | U'_1 | \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \rangle = 1, \\ \Gamma^{(z)}_{i_b i_b}(U'_1) &= \langle \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow | U'_1 | \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Os caracteres $\chi^{(z)}(R)$ no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z foram calculados a partir de considerações sobre as simetrias dos estados do tipo $|M_l\rangle$. Os seus valores estão expressos por números combinatórios indicados na Tabela 2.3. É evidente que o caracter do elemento identidade $\chi^{(z)}(E)$ é igual à dimensão do subespaço.

A decomposição do subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z , através de (2.22), para as RI do grupo D_N , com $N = 14$ é dada por:

$$\Gamma^{I,1}, \Gamma^{I,4} : 133, \quad \Gamma^{I,2}, \Gamma^{I,3} : 113, \quad \Gamma^{II,1-6} : 245. \quad (2.25)$$

Tabela 2.3: Caracteres dos elementos de D_N no subespaço de autovalor nulo de S^z .

$\chi^{(z)}(E)$	$\chi^{(z)}(C_N^p)$	$\frac{N}{2}$	$\chi^{(z)}(U_p)$	$\chi^{(z)}(U'_p)$
	$\overbrace{\begin{matrix} \text{ímpar} & \text{par} \\ 0 & \begin{pmatrix} m \\ m/2 \end{pmatrix} \end{matrix}}^p$			
$\begin{pmatrix} N \\ N/2 \end{pmatrix}$		ímpar	0	$2 \begin{pmatrix} \frac{N}{2} - 1 \\ \frac{1}{2}(\frac{N}{2} - 1) \end{pmatrix}$
m é o máximo divisor comum de N e p .		par	$\begin{pmatrix} \frac{N}{2} \\ \frac{N}{4} \end{pmatrix}$	$2 \begin{pmatrix} \frac{N}{2} - 1 \\ \frac{N}{4} \end{pmatrix}$

Um cálculo detalhado para uma cadeia com apenas *quatro* sítios está indicado na seção B.1.1.

2.2.4 Construção da base de estados definidos pelas simetrias espaciais

Nesta seção será indicado o processo de construção de uma base ortonormal para um subespaço definido por um autovalor do operador S^z e pelos índices que identificam uma RI do grupo espacial de simetria \mathcal{G}^E , no caso D_N , e cada coluna dessa RI. Nessa base a matriz do Hamiltoniano fica na forma de blocos situados na diagonal. Será indicada também a tentativa de se construir uma base incluindo também a simetria de inversão do spin. Na seção B.1 será ilustrado o procedimento para construção de uma base referente a uma cadeia com quatro sítios cujo grupo de simetria é o D_4 .

Base

O ponto de partida é a base de estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$, da forma (A.3), associados a um mesmo autovalor de S^z . Neste trabalho a base construída é aquela associada ao autovalor nulo de S^z , cuja dimensão é $(N \ N/2)$. Um Operador de Projeção (A.5) é definido para cada função de base de uma RI. Aplica-se tal operador em todos os $(N \ N/2)$ estados do tipo produto direto. Se um estado do tipo produto direto contém a simetria da função de base da RI, então o operador de projeção gera um estado com a simetria daquela função de base (2.26). Se um estado do tipo produto direto não contém a simetria da função de base da RI, a aplicação do operador de projeção sobre esse estado resulta em um estado nulo (2.27). Por exemplo,³ para $N = 10$,

$$P_{i=1}^{\text{II},1} |93: \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle = 0.425325404176020 (|93\rangle + |186\rangle - |837\rangle - |930\rangle) + 0.262865556059567 (|372\rangle - |465\rangle + |558\rangle - |651\rangle), \quad (2.26)$$

$$P_{i=1}^{\text{II},1} |167: \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle = 0. \quad (2.27)$$

³Na base binária os números foram escritos da esquerda para a direita. \uparrow e \downarrow indicam respectivamente os algarismos 1 e 0.

Selecionam-se todos os estados não nulos resultantes da aplicação do operador de projeção em todos os estados do tipo produto direto associados ao subespaço de interesse de S^z . Haverão estados proporcionais entre si. Por exemplo, $P_{i=1}^{\text{II},1} |93\rangle$ e todos os estados gerados pela aplicação do projetor $P_{i=1}^{\text{II},1}$ em cada produto direto do lado direito da expressão (2.26) são proporcionais entre si, salvo possivelmente estados nulos que daí possam resultar. O estado $P_{i=1}^{\text{II},1} |93\rangle$ é incluído na nova base de estados e os estados proporcionais a ele são descartados. É evidente que ele é ortogonal a qualquer outro estado da nova base, porque nenhum deles conterà nenhum de seus produtos diretos componentes.

Há um outro tipo de estado gerado por um projetor. Por exemplo, $P_{i=1}^{\text{II},1} |47\rangle$ e todos os estados gerados pela aplicação do projetor $P_{i=1}^{\text{II},1}$ em cada produto direto do lado direito da expressão (2.28) formam um conjunto de estados linearmente dependentes, LD, os quais definem um sub-subespaço de dimensão *dois*. Ao se descartar estados proporcionais repetidos e eventuais estados nulos, restarão *cinco* estados LD. Após processo de ortogonalização restarão *dois* estados linearmente independentes.

$$P_{i=1}^{\text{II},1} |47: \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle = \begin{array}{l} \text{comb. linear} \\ \text{coef. reais} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} |47\rangle, |61\rangle, |94\rangle, |122\rangle, |188\rangle, |244\rangle, |271\rangle, |376\rangle, |481\rangle, |488\rangle, \\ |535\rangle, |542\rangle, |647\rangle, |752\rangle, |779\rangle, |835\rangle, |901\rangle, |929\rangle, |962\rangle, |976\rangle \end{array} \right\}, \quad (2.28)$$

$$P_{i=1}^{\text{II},1} |55: \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle = \begin{array}{l} \text{comb. linear} \\ \text{coef. reais} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} |55\rangle, |59\rangle, |110\rangle, |118\rangle, |220\rangle, |236\rangle, |391\rangle, |440\rangle, |451\rangle, |472\rangle, \\ |539\rangle, |541\rangle, |707\rangle, |737\rangle, |781\rangle, |782\rangle, |865\rangle, |880\rangle, |902\rangle, |944\rangle \end{array} \right\}. \quad (2.29)$$

A ortogonalização da base do subespaço definido por um autovalor de S^z e pela simetria de um projetor não é tão custosa computacionalmente como poderia parecer em princípio. Não é necessário ortogonalizarem-se todos os estados de tal subespaço em um único processo. Por exemplo, os estados LD gerados pela aplicação do projetor $P_{i=1}^{\text{II},1}$ em (2.28) são ortogonais aos estados LD gerados pela aplicação do mesmo projetor $P_{i=1}^{\text{II},1}$ em (2.29). Realiza-se ortogonalização em cada conjunto separadamente.

Dessa maneira é construída uma base ortogonal para cada subespaço de interesse. Serão chamados estados do tipo 1 aqueles como $P_{i=1}^{\text{II},1} |93\rangle$, e estados do tipo 2 aqueles provenientes de estados como $P_{i=1}^{\text{II},1} |47\rangle$. A classificação desses dois tipos de estados será útil para se distinguir uma diferença de comportamento da dinâmica da magnetização do Hamiltoniano XX mencionada na seção 4.3.3, onde se discute a possibilidade de os estados do tipo 1 serem equivalentes, em certo sentido, aos estados $\rho_0(S^z)$ definidos na seção 3.2. Os projetores de RI unidimensionais somente geram estados do tipo 1.

O fato de a ortogonalização ser realizada separadamente em conjuntos de estados, não impede que os elementos de matriz do Hamiltoniano entre os estados ortogonalizados resultantes desses conjuntos sejam não nulos.

Um estado típico da base ortogonalizada será simbolizado por,

$$|P_r^\beta\rangle = \sum_l b_r^{\beta,l} |M_l\rangle, \quad (2.30)$$

onde o índice r simboliza o conjunto dos dois índices μ e i de uma Representação Irredutível e de uma coluna dessa RI, os quais definem um Operador de Projeção (A.5). O índice μ pode referir-se tanto a uma RI de dimensão *um*, Tabela 2.1, onde sempre $i = 1$, como a uma RI de dimensão *dois*, Tabela 2.2, onde $i = 1$ ou 2 . O grupo D_N não tem RI de dimensão maior que *dois*. Todos os coeficientes de todos os estados $|P_r^\beta\rangle$ são reais, o que decorre da escolha das RI com matrizes reais, Tabelas 2.1 e 2.2.

Um estado $|P_r^\beta\rangle$ nem sempre corresponde à aplicação de um projetor em um estado do tipo produto direto. Pela maneira como os estados do tipo 2 foram construídos, a cada par desses estados, um corresponde, enquanto o outro, devido ao processo de ortogonalização, não necessariamente corresponde.

Há uma ressalva a se fazer. As bases de estados $|P_r^\beta\rangle$ para cadeias com 10 ou 14 sítios foram construídas para todo o subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z . Entretanto, para cadeias com 8, 12 ou 16 sítios apenas frações da base de estados foram construídas corretamente neste trabalho: apenas os estados associados às quatro RI unidimensionais, onde se encontra o estado fundamental, e à algumas RI bidimensionais particulares caracterizadas por terem seus elementos de matriz $\Gamma_{ii}^{(\mu)}(R)$ iguais a 0 ou ± 1 . A correteza ou a incorreteza das bases foram verificadas para os sistemas com até 12 sítios comparando os autovalores obtidos através de dois processos de diagonalização do Hamiltoniano XXZ, um utilizando a base dos produtos diretos $|M_l\rangle$, e o outro a base dos $|P_r^\beta\rangle$.

Base - Inversão do spin

Foi feita uma tentativa para se criar uma base de estados para o subespaço correspondente ao autovalor nulo de S^z , incluindo-se a simetria de inversão do spin. Esse é o único subespaço onde a operação de inversão do spin gera estados com mesmo autovalor de S^z .

Bases definidas pela simetria de inversão do spin foram construídas corretamente, neste trabalho, tanto para cadeias com 10 ou 14 sítios como para cadeias com 8, 12 ou 16 sítios. Porém, tais bases somente foram construídas corretamente para os estados associados às quatro RI unidimensionais e à algumas RI bidimensionais particulares caracterizadas por terem seus elementos de matriz $\Gamma_{ii}^{(\mu)}(R)$ iguais a 0 ou ± 1 .

2.3 Matriz do Hamiltoniano

Devido à relação de comutação (2.9) escreve-se a matriz do operador Hamiltoniano XYZ na forma de blocos situados na diagonal, em uma base de auto-estados de \mathcal{L} . Sendo o número de sítios, N , um número par, os autovalores do operador S^z serão sempre números inteiros, seção A.1.1. Os autovalores de S^z pares $0, \pm 2, \pm 4, \dots$ e os autovalores ímpares $\pm 1, \pm 3, \dots$ definem dois subespaços cujas dimensões são iguais a 2^{N-1} . Cada um desses dois subespaços corresponde aos autovalores $+1$ ou -1 do operador \mathcal{L} , (2.10). O acoplamento de estados de mesma paridade de S^z decorre dos termos $S_j^+ S_{j+1}^+$ e $S_j^- S_{j+1}^-$

do Hamiltoniano,

$$\mathcal{H}_{XYZ} = J^{(1)} \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{4}(\xi_x - \xi_y) (S_i^+ S_{i+1}^+ + S_i^- S_{i+1}^-) + \frac{1}{4}(\xi_x + \xi_y) (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + \xi_z S_i^z S_{i+1}^z \right], \quad (2.31)$$

Neste trabalho, o Hamiltoniano XYZ foi diagonalizado apenas para acoplamentos homogêneos entre primeiros vizinhos. Diagonalizaram-se numericamente as matrizes correspondentes a cadeias com até 12 sítios, porém a maior parte dos cálculos foi feita para cadeias com 10 sítios.

Na base dos produtos diretos $|M_l\rangle$, (A.3), a matriz do Hamiltoniano é real e simétrica. No processo de diagonalização foi utilizada uma rotina padronizada de diagonalização numérica de matrizes reais e simétricas.

$$\mathcal{H}_{XYZ} |\zeta\rangle = E_\zeta |\zeta\rangle, \quad |\zeta\rangle = \sum_l u_\zeta^l |M_l\rangle. \quad (2.32)$$

Os auto-estados $|\zeta\rangle$ foram expressos exclusivamente por coeficientes u_ζ^l reais. Entretanto, é possível escrever combinações lineares de auto-estados degenerados de maneira que os auto-estados resultantes sejam expressos por coeficientes complexos.

2.3.1 Teste de Consistência

Foi feito um teste de consistência do processo de diagonalização. Três conjuntos de valores dos parâmetros de anisotropia do Hamiltoniano XYZ, (2.1), podem ser escolhidos de maneira a serem obtidos três Hamiltonianos equivalentes: $\mathcal{H}_1(\xi_x^{\mathcal{H}_1}, \xi_y^{\mathcal{H}_1}, \xi_z^{\mathcal{H}_1})$, $\mathcal{H}_2(\xi_x^{\mathcal{H}_2}, \xi_y^{\mathcal{H}_2}, \xi_z^{\mathcal{H}_2})$ e $\mathcal{H}_3(\xi_x^{\mathcal{H}_3}, \xi_y^{\mathcal{H}_3}, \xi_z^{\mathcal{H}_3})$. A escolha dos três conjuntos dos parâmetros de anisotropia é feita segundo,

$$\xi_x^{\mathcal{H}_1} = \xi_y^{\mathcal{H}_2} = \xi_z^{\mathcal{H}_3} = a, \quad \xi_y^{\mathcal{H}_1} = \xi_z^{\mathcal{H}_2} = \xi_x^{\mathcal{H}_3} = b, \quad \xi_z^{\mathcal{H}_1} = \xi_x^{\mathcal{H}_2} = \xi_y^{\mathcal{H}_3} = c. \quad (2.33)$$

Em particular, tomaram-se os três limites planares, XY, YZ e ZX, do Hamiltoniano XYZ através de,

$$a \neq 0, b \neq 0, c = 0, \quad \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_{XY}, \quad \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_{YZ}, \quad \mathcal{H}_3 = \mathcal{H}_{ZX}. \quad (2.34)$$

O teste consistiu na verificação da coincidência entre os três espectros contendo todos os 2^N autovalores dos três Hamiltonianos para $N = 10$. Cada espectro contém autovalores nos dois subespaços de S^z , definidos por autovalores de S^z par e ímpar, cada um com dimensão 2^{N-1} . Deve-se lembrar que: em todos esses casos o cálculo foi feito na mesma base de produtos diretos $|M_l\rangle$; nos três Hamiltonianos os subespaços de S^z par e ímpar ficam desacoplados; e os três Hamiltonianos planares equivalentes envolvem conjuntos de operadores diferentes $\mathcal{H}_1: S_j^x, S_j^y$; $\mathcal{H}_2: S_j^y, S_j^z$; $\mathcal{H}_3: S_j^z, S_j^x$. Não há coincidência entre os autovalores do Hamiltoniano XY em cada um dos dois subespaços de S^z com os autovalores dos Hamiltonianos YZ e ZX nos correspondentes subespaços. Tal falta de coincidência, contudo, não viola nenhuma regra.

2.3.2 XXZ — CCP — força bruta

Outro limite do Hamiltoniano XYZ é o XXZ, o objeto inicial de análise neste trabalho. Devido à relação de comutação (2.5) escreve-se a matriz do Hamiltoniano XXZ na forma de blocos situados na diagonal, em uma base de auto-estados de S^z . Os subespaços analisados foram aqueles definidos pelos seguintes autovalores de S^z : 0 , $\frac{N}{2} - 2$ e $\frac{N}{2} - 1$, quando expressos em unidades de \hbar .

2.3.3 XXZ — CCP — D_N — autovalor nulo de S^z

As simetrias espaciais da cadeia de spin com condições de contorno periódicas podem ser descritas pelo grupo de simetria espacial D_N , seção 2.1.2. Uma base de estados associados às simetrias espaciais foi construída como indicado na seção 2.2.4. A matriz que representa o Hamiltoniano XXZ escrita na base de estados $|P_r^\beta\rangle$, (2.30), tem todos os seus elementos reais, o que decorre de os Operadores de Projeção (A.5) serem definidos pelas RI do grupo D_N expressas por matrizes reais, Tabelas 2.1 e 2.2.

$$\mathcal{H}_{XXZ} |r\zeta\rangle = E_{r\zeta} |r\zeta\rangle, \quad |r\zeta\rangle = \sum_{\beta} U_{r\zeta}^{\beta} |P_r^{\beta}\rangle. \quad (2.35)$$

Onde r simboliza os dois índices μ e i associados respectivamente a uma RI e a uma função de base dessa RI, e explicita o fato de a matriz do Hamiltoniano ser colocada na forma de blocos situados ao longo da diagonal (A.2). Dessa maneira um auto-estado $|r\zeta\rangle$ não é expresso por nenhum estado $|P_{r'}^{\beta}\rangle$ com $r' \neq r$. Foi utilizada a mesma rotina padronizada de diagonalização numérica de matrizes reais e simétricas empregada na abordagem que não inclui as simetrias espaciais. Tal rotina fornece todos auto-estados em ordem crescente de energia, segundo o índice ζ . Os auto-estados foram expressos exclusivamente por coeficientes $U_{r\zeta}^{\beta}$ reais. Essa abordagem de diagonalização também pode ser aplicada ao Hamiltoniano XYZ, desde que apresente condições de contorno periódicas.

Simetria do Estado Fundamental e do Primeiro Excitado

O Hamiltoniano XXZ de uma cadeia com número N par de sítios apresenta, no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , o estado fundamental e o primeiro estado excitado definidos pela simetria de inversão do spin. Um desses estados é simétrico e o outro anti-simétrico sob a inversão do spin. Há uma alternância dessas simetrias a medida que N par varia. Se N for múltiplo de *quatro* o estado fundamental será simétrico e o primeiro excitado será anti-simétrico. Se N for par mas não for múltiplo de *quatro* tais simetrias serão intercambiadas [14].

Essa propriedade foi verificada independentemente através de três processos de diagonalização envolvendo bases de estados diferentes: produtos diretos, onde testaram-se sistemas com 8 e 10 sítios, estados definidos por simetrias espaciais, e estados definidos pela simetria de inversão do spin além das simetrias espaciais, onde testaram-se sistemas com 8, 10, 12, 14 ou 16 sítios.

Em ambos processos de diagonalização feitos através de bases de estados definidos por simetrias espaciais, envolvendo ou não a simetria de inversão do spin, verificou-se também que o estado fundamental e o primeiro estado excitado estão sempre associados às simetrias espaciais definidas pelas RI unidimensionais $\Gamma^{1,1}$ e $\Gamma^{1,4}$, Tabela 2.1. Além disso, entre esses dois auto-estados, aquele simétrico sob inversão do spin está associado à simetria $\Gamma^{1,1}$ e aquele anti-simétrico sob inversão do spin está associado à simetria $\Gamma^{1,4}$. Por outro lado, os demais auto-estados contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z e associados a qualquer uma das simetrias de inversão do spin podem ter simetria espacial $\Gamma^{1,1}$ ou $\Gamma^{1,4}$.

Nos processos de diagonalização onde não se explorou a simetria de inversão do spin, as identificações das simetrias de inversão do spin dos auto-estados do Hamiltoniano foram feitas examinando seus coeficientes e os correspondentes estados da base. No processo de diagonalização onde se explorou a simetria de inversão do spin — corretamente implementado neste trabalho para os estados definidos pelas RI de dimensão um do grupo espacial — a identificação de tal simetria é imediata.

Degenerescências dos Autovalores

A maior degenerescência não acidental para os níveis de um Hamiltoniano prevista por um grupo de simetria espacial que comuta com tal Hamiltoniano é igual à maior dimensão de uma das RI daquele grupo. O maior grupo espacial que comuta com um Hamiltoniano de spin com condições de contorno periódicas é o D_N ou um grupo isomorfo a ele (2.12). A maior dimensão de RI desse grupo é *dois*. Todos os Hamiltonianos tratados neste Capítulo apresentam simetria de inversão temporal. Quando o Hamiltoniano apresenta simetria de inversão temporal as degenerescências previstas pelo grupo espacial podem ser dobradas ou não, dependendo do grupo espacial, de cada RI e se o spin total do sistema é inteiro, $T^2 = +1$, ou semi-inteiro, $T^2 = -1$, seção A.4. Na seção A.4.1 verificou-se que não há degenerescências extras devido à simetria de inversão temporal para nenhuma RI do grupo D_N . Dessa maneira, considerando-se as simetrias espaciais e a de inversão temporal, a maior degenerescência esperada para os níveis do Hamiltoniano XXZ com CCP é *dois*.

As degenerescências de todos os níveis do Hamiltoniano XXZ contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z foram calculadas para cadeias com 10 ou 14 sítios. Sondagens foram feitas para cada um dos valores do parâmetro de anisotropia indicados na seguinte amostragem,

$$\Delta = \begin{cases} 0.1\,l, \, l = 0, 1, \dots, 20, \\ 0.01, 0.49, 0.51, 0.99, 1.01, 1.49, 1.51. \end{cases} \quad (2.36)$$

A presença de apenas singletos e dubletos foi observada para quase todos os valores de Δ dessa amostragem, e em todos esses casos obteve-se a mesma quantidade de singletos e de dubletos, respectivamente 128 e 1652 para $N = 14$, e 32 e 110 para $N = 10$. Degenerescências superiores foram encontradas para alguns valores de Δ , indicados nas Tabelas 2.4 e 2.5.

Tabela 2.4: Degenerescências: XXZ, CCP, $N = 14$, autovalor nulo de S^z , Dim = 3432.

AMT indica os valores de Δ da amostragem (2.36) que não estão indicados nas Tabelas 2.4, 2.5 e 2.6. Para tais valores, e no subespaço analisado, estão associados apenas singletos e dubletos se os Hamiltonianos tiverem CCP, e apenas singletos se os Hamiltonianos tiverem extremidades livres. O Hamiltoniano planar isotrópico XX, $\Delta = 0$, apresenta degenerescências muito altas.

$\Delta \backslash \text{deg}$	1	2	4	5	6	8	12	18	20	40	48	88	104
AMT	128	1652											
1.0	127	1650		1									
0.5	54	733	457		2		6						
0.0	14	1	48			48		12	24	24	8	2	6

Tabela 2.5: Degenerescências: XXZ, CCP, $N = 10$, autovalor nulo de S^z , Dim = 252.

$\Delta \backslash \text{deg}$	1	2	4	6	8	18	20
AMT	32	110					
1.5	32	107		1			
1.0	28	110	1				
0.5	18	78	18	1			
0.0	6	1	16		8	2	4

Tabela 2.6: Degenerescências: XXZ, extremidades livres, $N = 10$, autovalor nulo de S^z , Dim = 252.

$\Delta \backslash \text{deg}$	1	2	6
AMT	252		
0.5	162	45	
0.0	32	80	10

Tabela 2.7: Degenerescências: XX, $\Delta = 0$, impurezas, $N = 10$, autovalor nulo de S^z , Dim = 252.

$J^{(\text{imp})}$ foi aplicado a apenas um acoplamento entre dois sítios. Os demais acoplamentos são dados por $J^{(1)} = 1$. CCP corresponde a $J^{(\text{imp})} = 1$ e o caso com extremidades livres a $J^{(\text{imp})} = 0$. VJI indica os seguintes valores para $J^{(\text{imp})}$: 0.1 l , $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm 9$.

$J^{(\text{imp})} \backslash \text{deg}$	1	2	4	6	8	16	18	20	36
+1	6	1	16		8		2	4	
VJI	32	80		10					
-1		4	8		4	4		4	1

As degenerescências superiores a *dois* não são justificadas pelas simetrias espaciais nem pela simetria de inversão temporal. Não foram identificadas quais operações de simetria extras podem estar presentes. Tais simetrias serão referidas como *escondidas*. Conclui-se apenas que estão no espaço de spin.

No caso de $\Delta = 1.5$, há apenas um nível de degenerescência superior a *dois*, igual a *seis*, para cadeia com 10 sítios. No caso de $\Delta = 1$, correspondente à interação de Heisenberg isotrópica, há apenas um nível de degenerescência superior a *dois*, para ambas cadeias com 14 e 10 sítios. Supõe-se que tais degenerescências decorram de alguma particularidade dos números de sítios das cadeias. As degenerescências presentes no caso de $\Delta = 0.5$ são intermediárias entre aquelas encontradas para $\Delta = 1.5$ e $\Delta = 1$ por um lado e para $\Delta = 0$ por outro. Para a interação planar XX isotrópica, $\Delta = 0$, as degenerescências superiores a *dois* correspondem à grande maioria dos estados: os singletos e os dubletos representam para $N = 14$ e $N = 10$ apenas 0,47% e 3,2% do total dos níveis do subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z . Há muitas degenerescências, incluindo seis níveis distintos com degenerescência 104 para $N = 14$ e quatro níveis distintos com degenerescência 20 para $N = 10$.

O que é mais relevante para a discussão que será feita no Capítulo das Conclusões, seção 6.2.10, é que as altas degenerescências presentes no caso de $\Delta = 0$ estão associadas à simetrias nas coordenadas de spin. O entendimento de que as simetrias extras estejam associadas às coordenadas de spin é reforçado pela comparação entre as degenerescências presentes em uma cadeia com extremidades livres para diferentes valores do parâmetro Δ , Tabela 2.6, e pela presença de altas degenerescências em uma cadeia com uma ligação de troca diferente das demais e com $\Delta = 0$, Tabela 2.7. No Capítulo das Conclusões será proposta uma conexão entre as altas degenerescências do Hamiltoniano planar XX e sua versão fermiônica em termos de férmions independentes (3.16).

2.3.4 Uma Onda

Há dois subespaços de uma onda de spin, um deles contém estados do tipo produto direto $|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle$, e o outro, $|\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow \cdots \downarrow\rangle$. Devido à relação de comutação (2.5) o Hamiltoniano XXZ não tem elementos de matriz entre cada um dos subespaços de uma onda de spin e os demais subespaços. Como será mencionado na seção 4.4, em ambos subespaços as evoluções da magnetização são equivalentes, desde que não haja campos externos longitudinais aplicados. A menção a um subespaço de uma onda de spin fará referência indistintamente a qualquer um dos dois subespaços separadamente.

No subespaço de uma onda acrescentaram-se interações homogêneas entre segundos vizinhos e impurezas para acoplamentos entre primeiros vizinhos. O Hamiltoniano tratado é escrito como,

$$\mathcal{H}_{XXZ}^{(1 \text{ imp}) (2)} = \sum_{i=1}^N J_{i, i+1} (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z) + J^{(2)} \sum_{i=1}^N (S_i^x S_{i+2}^x + S_i^y S_{i+2}^y + \Delta S_i^z S_{i+2}^z). \quad (2.37)$$

Segundos Vizinhos

O Hamiltoniano com interações entre segundos vizinhos é não integrável. Apesar de o Hamiltoniano ser não integrável é possível obter expressões analíticas e exatas para os seus auto-estados e autovalores no subespaço de uma onda.

$$\mathcal{H}_{XXZ}^{(1)(2)} |\underline{k}\rangle = E_k^{(1,2)} |\underline{k}\rangle, \quad (2.38)$$

$$|\underline{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{ikj} |j\rangle, \quad (2.39)$$

$$E_k^{(1,2)} = J^{(1)} \cos k + J^{(2)} \cos 2k, \quad (2.40)$$

$$k = \frac{2\pi}{N} l, \quad l = 1, 2, \dots, N, \quad (2.41)$$

$$|j\rangle = |\uparrow\uparrow \dots \uparrow (j:\downarrow) \uparrow \dots \uparrow\rangle. \quad (2.42)$$

Única diagonalização analítica feita neste trabalho. Os auto-estados (2.39) são os estados de uma onda de spin. Eles são idênticos aos auto-estados do Hamiltoniano sem interações entre segundos vizinhos, pois não dependem de $J^{(2)}$.

Neste modelo, as interações entre segundos vizinhos $J^{(2)}$ são sempre homogêneas. No subespaço de uma onda de spin o parâmetro Δ (2.6) não origina um *gap* no espectro de energia na cadeia sem impurezas, com ou sem $J^{(2)}$. Alterando-se o parâmetro Δ o espectro meramente translada-se rigidamente. Na ausência de impurezas a máxima degenerescência encontrada é *dois*.

Impurezas

Foram consideradas duas situações. Uma onde a impureza não tem spin e está localizada próximo a dois sítios da cadeia, intersticial, e altera a ligação de troca entre esses sítios. Na outra situação há uma impureza de spin $\frac{1}{2}$ que ocupa um dos sítios da cadeia e origina duas ligações de troca diferentes das restantes. Em ambas situações todos os sítios da cadeia têm spin $\frac{1}{2}$, e continua sendo possível definir o subespaço de uma onda de spin. Tomaram-se apenas interações entre primeiros vizinhos. Todas as interações de troca foram modeladas pela mesma anisotropia axial dada pelo parâmetro Δ (2.6), e foram escolhidas como sendo antiferromagnéticas, $J^{(1)} = 1$ e $J^{(\text{imp})} \geq 0$. Trata-se de uma restrição arbitrária com a finalidade de diminuir o número de parâmetros, a fim de facilitar a análise.

Os três casos de interesse para interações entre primeiros vizinhos, correspondentes à cadeias com interações homogêneas, e com impurezas caracterizadas por uma ou por duas ligações diferentes das

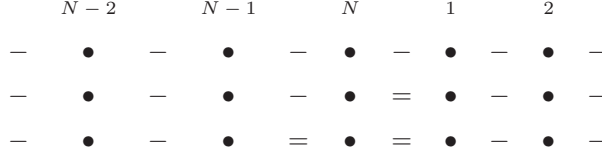
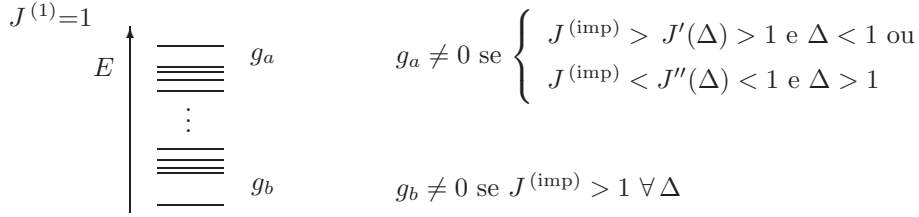


Figura 2.2: Ligações associadas à impurezas.

Figura 2.3: Banda do subespaço de uma onda. Impurezas, anisotropia axial da troca e *gap*.

demais, estão indicados em (2.43) e na Figura 2.2:

$$\begin{aligned}
 J_{i, i+1} &= J^{(1)} \quad \forall i \\
 J_{i, i+1} &= \begin{cases} J^{(1)} & i = 1, 2, \dots, N-1 \\ J^{(\text{imp})} & i = N \end{cases} \\
 J_{i, i+1} &= \begin{cases} J^{(1)} & i = 1, 2, \dots, N-2 \\ J^{(\text{imp})} & i = N-1, N \end{cases}
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

Impurezas e *gap*

Em contraste com os Hamiltonianos que envolvem apenas acoplamentos homogêneos $J^{(1)}$ e $J^{(2)}$, na presença de impurezas podem surgir dois pequenos *gaps* na banda de uma onda: g_b , entre o estado de mais baixa energia e os demais estados, e g_a , entre o estado de mais alta energia e os demais estados, conforme os valores de $J^{(\text{imp})}$ e Δ , ver Figura 2.3. Deve-se notar que $J^{(\text{imp})} = 1$ corresponde à ausência de impurezas, cadeia com interações homogêneas e com condições de contorno periódicas, e $J^{(\text{imp})} = 0$ a cadeia com extremidades livres. Quando $J^{(\text{imp})} < 1$ e $\Delta > 1$ pode surgir um nível dentro do *gap* g_a , se a impureza for descrita por uma ligação de troca diferente das demais, ou podem surgir um ou dois níveis, se a impureza for descrita por duas ligações de troca diferentes das demais, Figura 2.2.

Capítulo 3

Magnetização e Troca XY

Neste Capítulo e no próximo será tratado o problema da relaxação do spin em cadeias unidimensionais. A relaxação neste trabalho será analisada através de valores médios da magnetização em *ensembles* de estados iniciais que apresentam magnetização espacialmente não homogênea. A primeira seção deste Capítulo mostrará a grandeza quantificada e sua evolução temporal. Em seguida serão apresentados resultados descritos por soluções analíticas e exatas da dissertação de Tygel [4], referentes à dinâmica gerada pelos Hamiltonianos $XY(\gamma)$ e $XY(h, \gamma)$. Ambos incluem anisotropia da interação de troca, e o segundo inclui campo transverso. Serão apresentadas as evoluções temporais da magnetização geradas por ambos Hamiltonianos em sistemas finitos, e a relaxação nos limites assintóticos de número de sítios e tempo e infinitos referente ao Hamiltoniano $XY(\gamma)$ [4]. Finalmente, através de ajustes numéricos serão analisadas as soluções analíticas em sistemas finitos associadas às dinâmicas de ambos Hamiltonianos $XY(\gamma)$ e $XY(h, \gamma)$. A dinâmica gerada por $XY(\gamma)$ em sistemas finitos é compatível com sua relaxação em sistemas infinitos. Será inferido o comportamento da relaxação gerada por $XY(h, \gamma)$ a qual exibe semelhanças e diferenças com a do $XY(\gamma)$. O comportamento nos limites de número de sítios e tempo infinitos do Hamiltoniano $XY(\gamma)$ é comum a outros Hamiltonianos da família XY [2, 3].

3.1 Não Homogeneidade e sua Evolução Temporal

Para a quantificação da não homogeneidade da magnetização, introduz-se o operador cujo valor médio será o objeto central de análise neste trabalho,

$$S_Q^\alpha \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{iQj} S_j^\alpha, \quad \alpha = x, y, z, \quad (3.1)$$

onde Q é o número de onda associado a uma componente de Fourier da magnetização. O parâmetro de rede foi tomado como sendo $a = 1$. O operador S_Q^α não corresponde a um observável físico. Seus

elementos de matriz são complexos em geral, e nas bases construídas neste trabalho ele é simétrico.

A magnetização da cadeia pode ser descrita pelo conjunto de todos os valores médios,

$$\langle S_Q^\alpha \rangle, \quad Q = q \frac{2\pi}{N}, \quad q = 0, 1, \dots, N-1, \quad (3.2)$$

onde N é o número de sítios da cadeia de spins. De maneira alternativa, a magnetização da cadeia pode ser descrita pelo conjunto de todos os valores médios dos observáveis físicos,

$$\langle S_j^\alpha \rangle, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (3.3)$$

A preferência pela análise dos $\langle S_Q^\alpha \rangle$ ao invés dos $\langle S_j^\alpha \rangle$ decorre do fato de cada $\langle S_Q^\alpha \rangle$ expressar uma característica global da cadeia.

Os valores médios são tomados em *ensembles* de estados, os quais podem ser puros ou de mistura estatística. A energia desses *ensembles* de estados também é definida por um valor médio. Uma única réplica de um estado que não seja um auto-estado, por exemplo, um estado formado por uma superposição de auto-estados associados a autovalores distintos, não tem energia definida. Apenas os auto-estados têm energia bem definida. Os estados de energia não definida apresentam evolução temporal não trivial.

No instante inicial o *ensemble* é imaginado como sendo constituído de réplicas independentes e idênticas de um único estado puro¹ $|\psi_0\rangle$ ou por réplicas de um único operador densidade ρ_0 . Em um instante posterior os estados do *ensemble* são deterministicamente conhecidos pela sua evolução temporal. No caso de estados puros a evolução temporal é dada pela equação de Schrödinger. Quando o Hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, a solução da equação de Schrödinger pode ser escrita como,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} |\psi_0\rangle. \quad (3.4)$$

No caso de estados de mistura, a evolução temporal é dada pela equação de Liouville,

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho]. \quad (3.5)$$

A partir dessas equações fica evidente que a energia é conservada. As equações de Schrödinger e de Liouville não descrevem a preparação do estado inicial, e tampouco o processo de medida. Aplicam-se somente à evolução temporal de um estado dado. Os valores médios em qualquer tempo são expressos por,

$$\langle S_Q^\alpha \rangle_t \equiv \langle \psi(t) | S_Q^\alpha | \psi(t) \rangle = \langle \psi_0 | S_Q^\alpha(t) | \psi_0 \rangle, \text{ ou} \quad (3.6)$$

¹A preparação de estados puros idênticos não deve ser confundida com a imaginada operação de clonagem, a qual é proibida pela Mecânica Quântica para estados genéricos.

$$\langle S_Q^\alpha \rangle_t \equiv \text{Tr}[\rho(t) S_Q^\alpha] \quad (3.7)$$

$$= \text{Tr}[\rho_0 S_Q^\alpha(t)]. \quad (3.8)$$

De maneira análoga define-se a evolução para a média do operador S_j^α correspondente à magnetização em cada sítio j . Porém, neste trabalho, as médias $\langle S_j^\alpha \rangle$ serão calculadas através da transformada de Fourier inversa,

$$\langle S_j^\alpha \rangle_t = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{Q=2\pi/N}^{2\pi} e^{-iQj} \langle S_Q^\alpha \rangle_t. \quad (3.9)$$

3.1.1 Equilíbrio

Neste trabalho se dará destaque para o cálculo da magnetização, de maneira que o equilíbrio será definido a partir dos valores médios das componentes de Fourier da magnetização. O equilíbrio do sistema será caracterizado por todo estado a partir do qual os valores médios de todas as componentes de Fourier da magnetização permaneçam constantes no tempo, apesar de o sistema estar submetido a uma evolução contínua promovida pelo seu Hamiltoniano. No equilíbrio o estado do sistema estará permanentemente alterando-se,² por causa da evolução promovida pela equação de Schrödinger ou pela equação de Liouville. A definição de equilíbrio depende da propriedade a ser analisada. Nada em princípio garante que os tempos característicos para se atingir o equilíbrio sejam os mesmos para: os valores médios da magnetização, os valores médios de funções de correlação de dois operadores ou de ordens superiores, as grandezas associadas ao emaranhamento global do sistema, as quais serão apresentadas no Capítulo 5.

Quando o Hamiltoniano tem simetria de translação de qualquer múltiplo do parâmetro de rede, o que é satisfeito por acoplamentos homogêneos entre os sítios, o equilíbrio será caracterizado por um estado com magnetização espacialmente uniforme. Em termos dos modos $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$ o equilíbrio é descrito por,

$$\langle S_Q^\alpha \rangle_t \rightarrow 0, \quad \forall Q \neq 0. \quad (3.10)$$

O valor médio do modo homogêneo, caracterizado por $Q = 0$, no equilíbrio, depende do estado inicial e do Hamiltoniano. Quando há impurezas na cadeia de spins, as operações de simetrias de translação são drasticamente reduzidas e a magnetização do estado de equilíbrio não será mais uniforme,

$$\langle S_Q^\alpha \rangle_t \rightarrow F(\alpha, Q, \Upsilon) \text{ independente de } t, \quad (3.11)$$

onde Υ indica os parâmetros do Hamiltoniano.

²Excluindo-se evidentemente o caso trivial onde o estado inicial é um auto-estado, o que não é de interesse neste trabalho.

3.2 Cálculos Analíticos Anteriores: Famílias XY

Uma abordagem analítica e exata foi desenvolvida para a determinação da relaxação de cadeias de spins modeladas por Hamiltonianos da família XY [2, 3, 4]. Ela mostrou-se bem sucedida para o cálculo do valor médio da componente longitudinal da magnetização $\langle S_Q^z \rangle_t$, quando o estado inicial é um dos três seguintes tipos genéricos de mistura estatística,

$$\rho_0 = \rho_0(S^\alpha), \quad \alpha = x, y \text{ ou } z. \quad (3.12)$$

A única restrição nessa escolha de ρ_0 é a dependência com relação a apenas uma componente do spin. Nos trabalhos citados obtiveram-se resultados exatos para sistemas finitos, para o limite de sistemas infinitos, e em seguida, através do método da Fase Estacionária, no limite de tempo infinito. Foram encontradas duas propriedades marcantes nos processos de relaxação a partir dos estados iniciais sondados. Uma propriedade é a natureza lenta da relaxação, oscilatória e amortecida por uma lei de potência. A segunda propriedade notável ocorre para componentes de Fourier particulares da magnetização, cuja relaxação é ainda mais lenta. Tais componentes de Fourier críticas surgem apenas com a presença de *nesting* na curva de dispersão, seção 3.2.2, o que se constatou estar sempre acompanhado de um *gap* no espectro de energia. O número de onda do modo crítico é sintonizado pelos parâmetros do Hamiltoniano. As expressões analíticas apresentadas nesta seção foram retiradas ou adaptadas da dissertação de Tygel [4].

O Hamiltoniano tratado é expresso por,

$$\mathcal{H}_{XY} = J \left[h \sum_{i=1}^N S_i^z + \sum_{i=1}^N \left((1 + \gamma) S_i^x S_{i+1}^x + (1 - \gamma) S_i^y S_{i+1}^y \right) \right], \quad (3.13)$$

onde se impôs condições de contorno periódicas $S_1^\alpha = S_{N+1}^\alpha$. A integral de troca J tem dimensão de energia. Ela será tomada como sendo $J = 1$ no desenvolvimento subsequente. h é o campo reduzido, $h = g\hbar\mu_B H/J$, onde g é o fator giromagnético, \hbar é a constante de Planck sobre 2π e H é o campo magnético aplicado. Os operadores de spin foram tomados sem dimensão, $S_i^\alpha = \sigma_i^\alpha/2$. O limite XY isotrópico ou XX é atingido quando $\gamma = 0$, e o limite Ising quando $\gamma = 1$. Quando $h = 0$ e $\gamma \neq 0$, há um *gap* de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Os acoplamentos entre os spins primeiros vizinhos são antiferromagnéticos e homogêneos ao longo da cadeia. O acoplamento ferro ou antiferromagnético não é relevante para a diagonalização e para a evolução temporal dos modos da magnetização (3.8) quando o estado inicial é da forma (3.12).

O Hamiltoniano de spin XY pode ser levado a uma forma quadrática de férmions sem spin pela transformada de Jordan-Wigner [15].

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{XY} = & h \left(-\frac{N}{2} + \mathcal{N}_f \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\left(c_i^\dagger c_{i+1} + \gamma c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger \right) + \text{hc} \right] \\ & - \frac{1}{2} \left[\left(c_N^\dagger c_1 + \gamma c_N^\dagger c_1^\dagger \right) + \text{hc} \right] (\exp(i\pi\mathcal{N}_f) + 1), \end{aligned} \quad (3.14)$$

Tabela 3.1: \mathcal{H}_{XY} com CCP nas variáveis de spin.

Condições de Contorno do \mathcal{H}_{XY} nas variáveis fermiônicas (3.14): CC , c-cíclica e NCC , não c-cíclica. m é inteiro.

$N \backslash S^z$	par	ímpar		CC	NCC
$4m+2$	\boxed{CC}	NCC	ou	\mathcal{N}_f (3.15)	ímpar
$4m$	NCC	\boxed{CC}		\mathcal{L} (2.10)	par
					-1
					$+1$

onde,

$$\begin{aligned}
c_i^\dagger &\equiv L_i S_i^+, \quad c_i \equiv L_i S_i^-, \quad L_i \equiv \exp \left[\pm i \pi \sum_{l=1}^{i-1} c_l^\dagger c_{l+1} \right], \\
S_i^+ &= S_i^x + i S_i^y, \quad S_i^- = S_i^x - i S_i^y, \\
\mathcal{N}_f &\equiv \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j = \sum_{j=1}^N (S_j^z + 1/2) = S^z + N/2.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

O Hamiltoniano com condições de contorno periódicas para as interações descritas pelos operadores de spin corresponde a dois Hamiltonianos descritos pelos operadores fermiônicos, um com condições de contorno cíclicas, periódicas, e outro com condições de contorno não cíclicas. Cada caso é discriminado pelo estado sobre o qual o Hamiltoniano (3.14) atua. Os casos cíclico e não cíclico correspondem respectivamente aos estados definidos por número ímpar ou par de partículas fermiônicas \mathcal{N}_f , os quais, na representação de spin, estão associados aos autovalores -1 ou $+1$ do operador \mathcal{L} (2.10). Um estado na representação de spin está associado a um dos autovalores ± 1 do operador \mathcal{L} dependendo de o autovalor de S^z ser par ou ímpar e do número de sítios da cadeia ser par múltiplo de quatro ou não. Os casos cíclico e não cíclico apresentam-se como indicado na Tabela 3.1.

A diagonalização e todo o restante do tratamento analítico para o cálculo da magnetização foram feitos para o caso cíclico. A diagonalização completou-se com transformadas de Fourier e de Bogoliubov, deixando o Hamiltoniano escrito em termos de férmions independentes sem spin, com momento definido k ,

$$\mathcal{H}_{XY} = \sum_k \omega_k \eta_k^\dagger \eta_k + cte, \tag{3.16}$$

onde os autovalores são

$$\begin{aligned}
\omega_k &= \sqrt{(h + \cos k)^2 + \gamma^2 \sin^2 k}, \\
k &= \frac{2\pi}{N} m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(N/2 - 1), +N/2.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

diagonalização XY: analítica vs numérica

Em cada um dos dois subespaços de S^z associados ao casos cíclico e não cíclico, o Hamiltoniano tem N estados na versão fermiônica (3.14) ao invés de 2^{N-1} na versão de spin (3.13). Os autovalores e

auto-estados do Hamiltoniano na versão fermiônica estão contidos no espectro do Hamiltoniano na versão de spin. O restante do espectro da versão de spin é obtido combinando-se os autovalores e auto-estados da versão fermiônica.

Os pontos da curva de dispersão (3.17) calculados para os valores inteiros de κ , onde $k = \frac{2\pi}{N} \kappa$, coincidem com os autovalores obtidos através do cálculo numérico contidos no subespaço de S^z onde o Hamiltoniano é c-cíclico. Os pontos da curva de dispersão (3.17) calculados para os valores semi-inteiros de κ [12], coincidem com os autovalores obtidos através do cálculo numérico contidos no subespaço de S^z onde o Hamiltoniano é não c-cíclico, Tabela 3.2.

Evolução de $\langle S_Q^z \rangle_t$

O valor médio de cada modo longitudinal $\langle S_Q^z \rangle_t$ envolve médias de produtos dos operadores fermiônicos, que diagonalizam o Hamiltoniano, calculadas no estado inicial $\rho_0(S^\alpha)$. O cálculo do valor médio foi feito através de (3.8) ao invés de (3.7). Os produtos dos operadores fermiônicos estão associados a processos de transferência de momento Q , o mesmo número de onda Q do modo $\langle S_Q^z \rangle_t$:

$$\langle \eta_p^\dagger \eta_q \rangle_0, \quad \langle \eta_{-p} \eta_{-q}^\dagger \rangle_0, \quad \langle \eta_p^\dagger \eta_{-q}^\dagger \rangle_0, \quad \langle \eta_{-p} \eta_q \rangle_0, \quad (3.18)$$

$$p \equiv k - \frac{Q}{2}, \quad q \equiv k + \frac{Q}{2}. \quad (3.19)$$

Partindo do estado inicial $\rho_0(S^z)$, obtém-se para a cadeia finita,

$$\langle S_Q^z \rangle_t = \frac{1}{N} \langle S_Q^z \rangle_0 \sum_{k=0}^{\pi - \frac{2\pi}{N}} \{ C_{k,Q} \cos \Omega^- t + (2 - C_{k,Q}) \cos \Omega^+ t \}, \quad (3.20)$$

onde,

$$C_{k,Q} = \frac{1}{\omega_p \omega_q} \left(h^2 + 2h \cos k \cos \frac{Q}{2} + \cos^2 k \left[\cos^2 \frac{Q}{2} + \gamma^2 \sin^2 \frac{Q}{2} \right] - \sin^2 k \left[\gamma^2 \cos^2 \frac{Q}{2} + \sin^2 \frac{Q}{2} \right] \right), \quad (3.21)$$

e,

$$\Omega^\pm(k, Q, h, \gamma) \equiv \omega_p \pm \omega_q. \quad (3.22)$$

As parcelas da expressão (3.20) que envolvem Ω^- provêm dos valores médios $\langle \eta_p^\dagger \eta_q \rangle_0$ e $\langle \eta_{-p} \eta_{-q}^\dagger \rangle_0$, enquanto que as parcelas que envolvem Ω^+ provêm de $\langle \eta_p^\dagger \eta_{-q}^\dagger \rangle_0$ e $\langle \eta_{-p} \eta_q \rangle_0$.

Um aspecto a ser notado na equação (3.20) é que a dinâmica depende do estado inicial apenas através de um fator de escala complexo $\langle S_Q^z \rangle_0$,

$$\langle S_Q^z \rangle_t = \langle S_Q^z \rangle_0 f(Q, \Upsilon, t). \quad (3.23)$$

Tabela 3.2: Espectros nas versões fermiônica e de spin $N = 8$, $XY(\gamma)$, $\gamma = 0.5$.

Nesta Tabela se mostra que as energias dos estados na versão de spin podem ser obtidas a partir da energia do estado fundamental e de somas das energias dos estados na versão fermiônica.

Condições de contorno de (3.14): CC

versão de spin			versão fermiônica		
deg	E		deg	E	
1	-3.0811388		1	0.0811388	4b
1	-2.0811388	2a	8	0.2094306	5a+1b
8	-1.7905694	1a+1b	8	0.2905694	2a+3b
4	-1.5811388	3a	6	0.5000000	4a+2b
6	-1.5000000	2b	1	1.0811388	2a+4b
8	-1.2905694	2a+1b	8	1.2905694	4a+2b
1	-1.0811388	4a	6	1.5000000	6a+2b
6	-0.5000000	2a+2b	4	1.5811388	3a+4b
8	-0.2905694	4a+1b	8	1.7905694	5a+3b
8	-0.2094306	1a+3b	1	2.0811388	4a+4b
1	-0.0811388	6a	1	3.0811388	6a+4b
24	0.0000000	3a+2b			

κ	$\omega_k, k = \frac{2\pi}{N} \kappa$	
-3	0.7905694	b
-2	0.5000000	a
-1	0.7905694	b
0	1.0000000	2a
1	0.7905694	b
2	0.5000000	a
3	0.7905694	b
4	1.0000000	2a

Condições de contorno de (3.14): NCC

versão de spin			versão fermiônica		
deg	E				
1	-3.0866961				
6	-1.8869712	2c			
16	-1.5433480	1c+1d	κ	$\omega_k, k = \frac{2\pi}{N} \kappa$	
6	-1.1997249	2d	-2.5	0.5998624	c
1	-0.6872463	4c	-1.5	0.5998624	c
16	-0.3436231	3c+1d	-0.5	0.9434855	d
36	0.0000000	2c+2d	0.5	0.9434855	d
16	0.3436231	1c+3d	1.5	0.5998624	c
1	0.6872463	4d	2.5	0.5998624	c
6	1.1997249	4c+2d	3.5	0.9434856	d
16	1.5433480	3c+3d	4.5	0.9434855	d
6	1.8869712	2c+4d			
1	3.0866961	4c+4d			

onde Υ indica os parâmetros do Hamiltoniano, neste caso, h e γ . A função $f(Q, \Upsilon, t)$ é real e não depende de ρ_0 , de maneira que as partes real e imaginária de $\langle S_Q^z \rangle_t$ são sempre proporcionais. A expressão (3.23) permanece válida quando o estado inicial é da forma $\rho_0(S^x)$ ou $\rho_0(S^y)$, e para outros Hamiltonianos da família XY [3], apesar de as correspondentes expressões de $\langle S_Q^z \rangle_t$ serem diferentes da expressão (3.20).

As propriedades marcantes no processo de relaxação serão apresentadas logo a seguir, seção 3.2.1.

3.2.1 Limite Assintótico sem Campo Transverso

No trabalho [4], a relaxação da magnetização na cadeia de spins no limite assintótico de infinitos sítios em tempo infinito foi tratada para dois casos particulares do Hamiltoniano XY(h, γ), aquele sem campo transverso, $h = 0$, XY(γ), e o de Ising, $\gamma = 1$, com campo transverso. Em ambos os casos a relaxação a partir de um estado descrito pelo operador densidade dependente de apenas uma componente do operador de spin é oscilatória e amortecida por uma lei de potência. Nesta seção será apresentada a dinâmica desenvolvida pelo Hamiltoniano XY(γ), para o referido limite assintótico, onde emerge uma criticalidade, a qual especifica componentes de Fourier da magnetização que se extinguem mais lentamente que as demais componentes, o que se reflete nos valores dos parâmetros da lei de potência. Na seção 3.3 será mostrado como a criticalidade deixa sinais no sistema finito e como se comparam os comportamentos dos sistemas finito e infinito, enquanto que na seção 3.4 será apresentado o comportamento referente ao Hamiltoniano XY(h, γ) em sistemas finitos.

Ao se tomar o limite correspondente à cadeia infinita, a somatória em (3.20) é substituída por uma integral no momento k :

$$N \rightarrow \infty, \quad (3.24)$$

$$\langle S_Q^z \rangle_t = \frac{1}{\pi} \langle S_Q^z \rangle_0 \int_0^\pi dk \{ C_{k,Q} \cos \Omega^- t + (2 - C_{k,Q}) \cos \Omega^+ t \}. \quad (3.25)$$

Toma-se em seguida o limite de tempo infinito,

$$t \rightarrow \infty. \quad (3.26)$$

O parâmetro t aparece nos argumentos das funções oscilatórias, de maneira que no limite de t grande o integrando oscila muito rapidamente para pequenos incrementos da variável de integração. Em quase todo intervalo de integração a integral anula-se. A contribuição não nula vem de parcelas ao redor dos pontos estacionários, PE, da variável de integração das funções $\Omega^\pm(k, Q, \Upsilon)$. Por exemplo, as rápidas oscilações e as marcas dos PE podem ser observados em um sistema finito com 1200 sítios. A Figura 3.1 mostra a dependência de cada termo que envolve Ω^+ na somatória (3.20) com k . Essa Figura seria o análogo do correspondente integrando do sistema infinito.

Os PE k_e são definidos por,

$$\left. \frac{\partial \Omega^\pm(k, Q, \Upsilon)}{\partial k} \right|_{k=k_e} = 0. \quad (3.27)$$

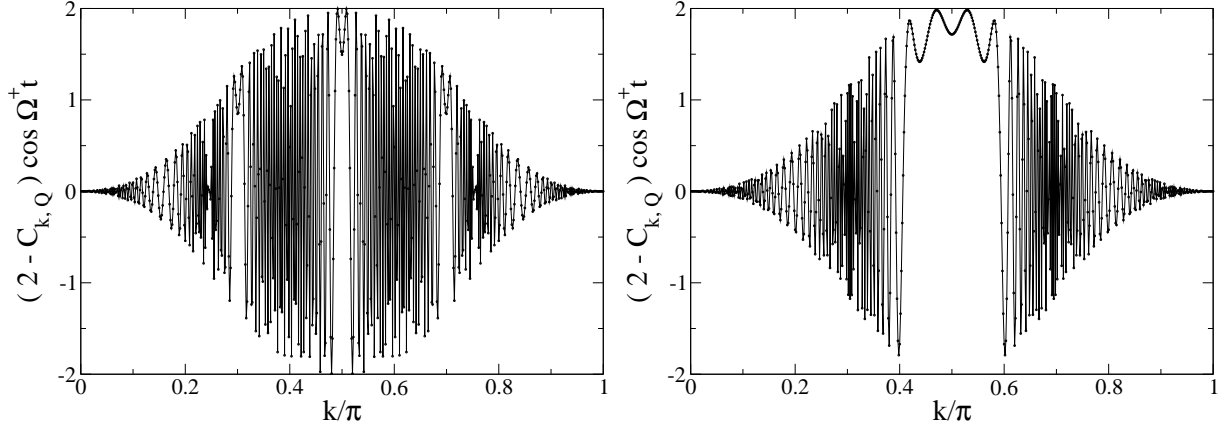


Figura 3.1: $(2 - C_{k,Q}) \cos \Omega^+ t$ vs k , (3.20). $N = 1200$, $\gamma = 0.5$. (a) $Q = \frac{280}{600}\pi$, $t = 4716.7$, (b) $Q = \frac{240}{600}\pi$, $t = 2747.8$. $Q = \frac{240}{600}\pi$ corresponde a $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ com amplitudes maiores que $Q = \frac{235}{600}\pi$, o qual corresponde ao Q_c do sistema infinito (3.30). Os dois instantes de tempo foram escolhidos antes das correspondentes primeiras reconstruções parciais, as quais serão definidas na seção 3.3.1.

O cálculo da integral através do método da Fase Estacionária leva a um comportamento assintótico da magnetização, oscilatório e amortecido por leis de potência,

$$\langle S_Q^z \rangle_{t \rightarrow \infty} \sim \sum_n K_n^+ e^{i\Theta_n^+ t} \left(\frac{t}{\tau_n^+} \right)^{-\nu_n^+} + \sum_n K_n^- e^{i\Theta_n^- t} \left(\frac{t}{\tau_n^-} \right)^{-\nu_n^-}, \quad (3.28)$$

onde o índice n especifica os pontos estacionários. A expressão (3.28) constitui a primeira propriedade importante sobre a relaxação no modelo XY.

A inversão da ordem dos limites, do número de sítios da cadeia e do tempo (3.24) e (3.26), não leva ao mesmo resultado. Em geral, para N finito, o limite $t \rightarrow \infty$ não está definido, excetuando escolhas particulares do estado inicial e do número de onda Q , para as quais o valor médio $\langle S_Q^z \rangle_t$ é constante no tempo.

A função Ω^- apresenta dois pontos estacionários e a função Ω^+ apresenta três ou cinco pontos estacionários conforme os valores de Q e γ .

$$\left. \begin{aligned} o_1^+ &= 0, \quad o_2^+ = \pi, \quad o_3^+ = \frac{\pi}{2}, \\ o_4^+ &= \frac{1}{2} \arccos\left(-\frac{1}{\lambda} \cos Q\right) \\ o_5^+ &= \pi - \frac{1}{2} \arccos\left(-\frac{1}{\lambda} \cos Q\right) \end{aligned} \right\} \text{ se } Q \in [Q_c, \pi - Q_c] \quad (3.29)$$

$$\left. \begin{aligned} o_1^- &= \frac{1}{2} \arccos(-\lambda \cos Q) \\ o_2^- &= \pi - \frac{1}{2} \arccos(-\lambda \cos Q) \end{aligned} \right\} \quad \forall Q$$

onde,

$$\lambda = \frac{1-\gamma}{1+\gamma}, \quad Q_c \equiv \arccos \frac{1-\gamma_c}{1+\gamma_c}. \quad (3.30)$$

Há pontos estacionários de degenerescência tripla $k_e^{(3)}$, em Ω^+ , definidos pelos pares,

$$\gamma_c, Q_c, \quad \text{ou} \quad \gamma_c, \pi - Q_c. \quad (3.31)$$

No ponto estacionário $k_e^{(3)}$ triplamente degenerado as derivadas segunda e terceira de Ω^+ também são nulas e a quarta derivada é não nula.

$$\left. \frac{\partial \Omega^+}{\partial k} \right|_{k=k_e^{(3)}} = \left. \frac{\partial^2 \Omega^+}{\partial k^2} \right|_{k=k_e^{(3)}} = \left. \frac{\partial^3 \Omega^+}{\partial k^3} \right|_{k=k_e^{(3)}} = 0, \quad \left. \frac{\partial^4 \Omega^+}{\partial k^4} \right|_{k=k_e^{(3)}} \neq 0. \quad (3.32)$$

Uma indicação do efeito das degenerescências dos PE pode ser vista na Figura 3.1 (b), a qual corresponde a uma degenerescência tripla, enquanto a Figura 3.1 (a) corresponde a três PE não degenerados. Uma consequência é que na Figura 3.1 (b) há maior número de parcelas associadas a diferentes valores de k somando-se construtivamente do que na Figura 3.1 (a).

O ponto estacionário triplamente degenerado origina parâmetros ν_n^+ e τ_n^+ (3.28) diferentes dos parâmetros originados pelos PE não degenerados. O expoente ν_n^+ sofre um salto descontínuo quando a condição de degenerescência é atingida. No caso de o estado inicial ser da forma $\rho_0(S^z)$, e para o PED definido por (γ_c, Q_c) , tal salto é de $\frac{1}{2}$ para $\frac{1}{4}$, Figura 3.2, e para o PED definido por $(\gamma_c, \pi - Q_c)$, o salto é de $\frac{3}{2}$ para $\frac{3}{4}$. Entre todas as parcelas de (3.28) aquelas que dominam a dinâmica de $\langle S_Q^z \rangle_{t \rightarrow \infty}$ são as de menor expoente ν_n^+ . No caso de (γ_c, Q_c) o expoente $\frac{1}{4}$ é dominante sobre os expoentes $\frac{1}{2}$ dos PE não degenerados, e o salto descontínuo de ν se faz notar nitidamente na dinâmica de $\langle S_Q^z \rangle_t$ no sistema finito, Figuras 3.12 e 3.17. Nessa última Figura o modo $Q = \frac{240}{600}\pi$ é aquele que mais se assemelha ao modo crítico Q_c do sistema infinito. Por outro lado, no caso de $(\gamma_c, \pi - Q_c)$ o expoente $\frac{3}{4}$ não é dominante sobre os expoentes $\frac{1}{2}$ dos PE não degenerados, e há apenas uma tênue indicação do salto descontínuo de ν na dinâmica de $\langle S_Q^z \rangle_t$ no sistema finito, Figuras 3.12 (b) e 3.18. Nessa última Figura há indicação de um batimento tênue. Há batimentos bastante pronunciados nas proximidades da criticalidade ao redor do ponto crítico (γ_c, Q_c) , como pode ser visto na Figura 3.17.

A taxa de relaxação é dada pelo módulo,

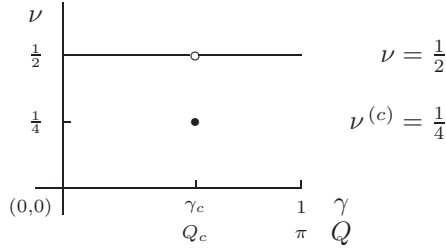
$$\frac{1}{\tau^\pm} = \left| \frac{\partial^2 \Omega^\pm}{\partial k^2} \right|_{k=k_e} \quad (3.33)$$

τ^+ diverge na vizinhança do PED,

$$\frac{1}{\tau^+} \rightarrow 0, \quad \text{se } |Q| \rightarrow Q_c, \quad \text{ou se } \gamma \rightarrow \gamma_c, \quad (3.34)$$

No ponto estacionário degenerado a taxa de relaxação τ_c é finita, e é dada pelo módulo,

$$\frac{1}{\tau_c^+} = \left| \frac{\partial^4 \Omega^+}{\partial k^4} \right|_{k=k_e^{(3)}} \quad (3.35)$$

Figura 3.2: Criticalidade de ν . Estado inicial, $\rho_0(S^z)$.

A relaxação crítica, ainda mais lenta, caracterizada por (3.34) e pela Figura 3.2 constitui a segunda propriedade notável referente a relaxação desenvolvida pelo Hamiltoniano XY(γ). Essa propriedade está associada à presença de *nesting* na curva de dispersão, o qual está acompanhado de um *gap* no espectro de energia. A condição para haver *nesting* e *gap* no espectro de energia do Hamiltoniano XY(γ) é $\gamma \neq 0$. O Hamiltoniano XX, $\gamma = 0$, que não tem *nesting* nem *gap*, apresenta relaxação amortecida por uma lei de potência (3.28), mas não desenvolve a relaxação crítica.

Limite isotrópico

O valor de $\langle S_Q^z \rangle_t$ obtido pela solução do Hamiltoniano XY anisotrópico, $\gamma \neq 0$, no limite isotrópico $\gamma = 0$, coincide com o valor obtido pela solução do Hamiltoniano XX. O cálculo de $\langle S_Q^z \rangle_t$ feito através da diagonalização do Hamiltoniano XX e desenvolvido a partir do estado inicial $\rho_0(S^z)$ fornece para a cadeia finita,

$$\begin{aligned} \langle S_Q^z(\gamma = 0) \rangle_t &= \frac{2}{N} \langle S_Q^z \rangle_0 \sum_{k=\frac{2\pi}{N}}^{\pi} \cos \Omega' t \\ \omega'_k &\equiv \cos k \\ \Omega' &\equiv \omega'_p - \omega'_q = 2 \sin k \sin \frac{Q}{2}. \end{aligned} \tag{3.36}$$

3.2.2 Nesting

O *nesting* pode surgir em curvas de dispersão se houver dois trechos da curva que sejam ‘paralelos’ entre si. Isso permite que haja alta densidade de processos como $\langle \eta_p^\dagger \eta_{-q}^\dagger \rangle_0$ e $\langle \eta_{-p} \eta_q \rangle_0$ que envolvam a mesma transferência de momento. O que interessa no cálculo dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ da magnetização é a existência de *nesting* com transferência de momento Q . A curva de dispersão do Hamiltoniano XY(γ), $h = 0$, (3.17) apresenta *nesting* se $\gamma \neq 0$. Nesse caso o *nesting* é caracterizado por pontos de inflexão da curva de dispersão, onde a derivada segunda anula-se, e cujas derivadas primeiras tenham o mesmo valor. A Figura 3.3 mostra por exemplo a situação para $\gamma = 0.5$. Os pontos de inflexão indicados nessa Figura devem ser associados aos momentos p e q (3.19). Se $p = 418 \frac{2\pi}{1200}$ e $-q = -182 \frac{2\pi}{1200}$ então $Q = -236 \frac{2\pi}{1200}$ e $k = \frac{\pi}{2}$. Se $p = 182 \frac{2\pi}{1200}$ e $-q = -418 \frac{2\pi}{1200}$ então $Q = 236 \frac{2\pi}{1200}$ e $k = \frac{\pi}{2}$. O valor obtido

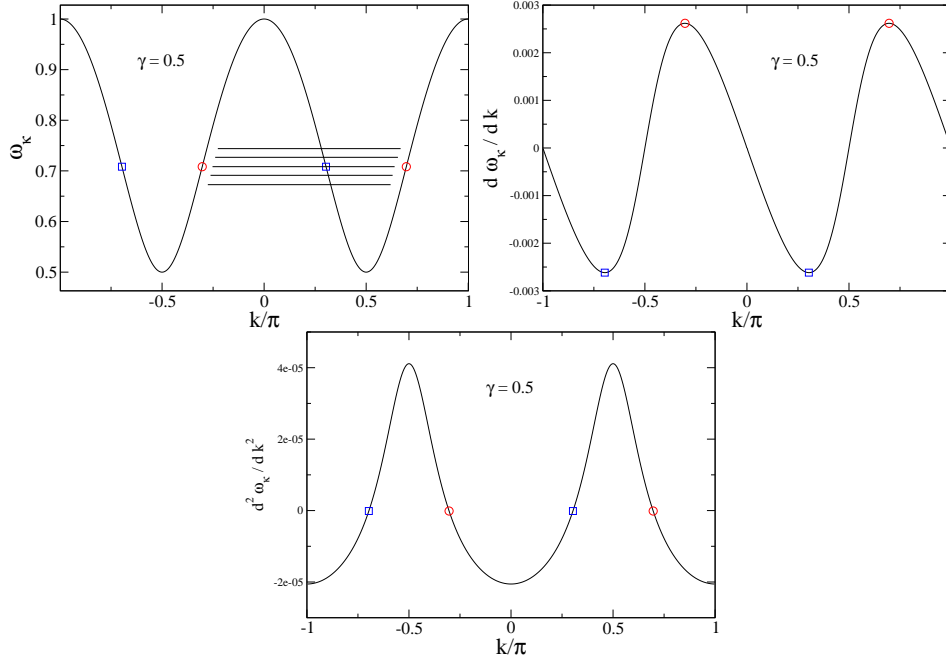


Figura 3.3: *Nesting*. $\gamma = 0.5$. ω_k vs k , (3.17). $\frac{\partial \omega_k}{\partial k}$ vs k . $\frac{\partial^2 \omega_k}{\partial k^2}$ vs k . A derivada segunda anula-se aproximadamente nos pontos $k = \pm 418 \frac{2\pi}{1200}$ e $k = \pm 182 \frac{2\pi}{1200}$. Há *nesting* associado aos pontos $418 \frac{2\pi}{1200}$ e $-182 \frac{2\pi}{1200}$ como também aos pontos $-418 \frac{2\pi}{1200}$ e $182 \frac{2\pi}{1200}$. Em cada um desses dois pares de pontos a derivada primeira tem o mesmo valor.

para k corresponde ao ponto estacionário o_3^+ (3.29). O valor obtido para Q coincide com o valor crítico $Q_c(\gamma = 0.5) \approx 235.1 \frac{2\pi}{1200}$ (3.30), de maneira que o PE k é de fato triplamente degenerado $k_e^{(3)}$: o_3^+ , o_4^+ e o_5^+ .

Interferência Construtiva

Os modos de relaxação crítica resultam de processos de interferência quântica construtiva que se manifestam mais intensamente do que nos modos de relaxação não crítica. Esses processos críticos são provenientes da degenerescência de pontos estacionários e do *nesting*. Os argumentos das funções oscilatórias da integral (3.25) variam lentamente em uma vizinhança bastante larga do PE degenerado, Figura 3.1 (b), de maneira que uma alta densidade de processos de transferência de momento Q interferem coerentemente. Estados preparados de maneira que sua magnetização espacial seja caracterizada somente por modos críticos, em um certo sentido têm relaxação proibida. Essa é a característica física que atrai interesse.

3.2.3 Objetivo inicial

As duas características mais importantes da relaxação da magnetização na cadeia $XY(\gamma)$ constituída de spins $\frac{1}{2}$ — o amortecimento caracterizado por uma lei de potência e a conexão entre a existência do *nesting* e do *gap* e o surgimento dos modos críticos, quando o estado inicial é descrito pelo operador densidade dependente de apenas uma componente do operador de spin (3.12) — estão presentes quando a dinâmica é gerada por outros Hamiltonianos da família XY [2, 3]. Tais características do processo de relaxação da magnetização são uma particularidade associada aos Hamiltonianos da família XY , ou são universais para Hamiltonianos de sistemas de spin $\frac{1}{2}$ unidimensionais?

A suposição de ser universal para sistemas unidimensionais a ocorrência de modos críticos apenas quando há *nesting* e *gap* no espectro do Hamiltoniano constitui a conjectura que motivou inicialmente este trabalho. É evidente que essa conjectura pressupõe que a relaxação seja amortecida por uma lei de potência. Não se espera que deva valer para qualquer estado inicial, porém para estados arbitrários como aqueles analisados, descritos pelo operador densidade dependente de apenas uma componente do spin (3.12).

Todavia, no Capítulo 4, seção 4.3.4, serão apresentados fortes indícios de que o Hamiltoniano de Heisenberg XXZ não se enquadra nessa hipótese de universalidade, quando a dinâmica está contida no subespaço do autovalor nulo do operador S^z . Apesar dessa diferença de comportamento, no subespaço de uma onda de spin do Hamiltoniano XXZ verifica-se relaxação amortecida por uma lei de potência, a partir de estados do tipo produto direto. De qualquer maneira buscar-se-á estabelecer uma associação entre a relaxação e a estrutura do espectro de energia.

3.3 $XY(\gamma)$ Sistema Finito comparado com o Infinito

Antes de se considerar o modelo de Heisenberg, onde o estudo foi feito em sistemas finitos, será analisado como se manifesta a criticalidade da relaxação do Hamiltoniano $XY(\gamma)$ em uma cadeia finita.

Os modos críticos podem surgir somente em sistemas infinitos, onde tomam-se os limites de cadeia e tempo infinitos, e então tratam-se os pontos estacionários (3.27) e suas degenerescências. A rigor o sistema finito não desenvolve criticalidade. À criticalidade do sistema infinito corresponde uma ‘marca’ no sistema finito. Através de um critério numérico, indicado na Figura 3.11, foi possível associar parâmetros ν e τ à evolução da magnetização em um sistema finito. Foram feitos ajustes numéricos a partir da expressão analítica de $\langle S_Q^z \rangle_t$ (3.20), e também separadamente em suas parcelas que envolvem apenas Ω^+ ou Ω^- , (3.22),

$$\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{\pi - \frac{2\pi}{N}} (2 - C_{k,Q}) \cos \Omega^+ t, \quad (3.37)$$

$$\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{\pi - \frac{2\pi}{N}} C_{k,Q} \cos \Omega^- t, \quad (3.38)$$

as quais relacionam-se através da expressão (3.20),

$$\frac{\langle S_Q^z \rangle_t}{\langle S_Q^z \rangle_0} = \langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} + \langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}. \quad (3.39)$$

A marca da criticalidade no sistema finito manifesta-se nos parâmetros ν^+ e τ^+ . A compatibilidade dos valores de tais parâmetros ajustados com os resultados dos correspondentes valores no limite de tempo infinito da cadeia infinita foi significativa. Essa compatibilidade respalda a abordagem analítica para o limite assintótico de cadeias e tempos infinitos através do método da Fase Estacionária, além de exibir o comportamento do sistema finito.

3.3.1 Reconstruções e Coincidências

Antes de serem feitos os ajustes referentes aos parâmetros ν e τ em sistemas finitos, compararam-se as evoluções de sistemas finitos com números de sítios diferentes. Há certos comportamentos de $\langle S_Q^z \rangle_t$, $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ a serem destacados, entre eles as reconstruções da magnetização e as coincidências entre as evoluções de modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ em sistemas finitos com números de sítios diferentes.

Reconstruções parciais

A evolução da magnetização³ em um sistema finito com número de sítios suficientemente grande exibe comportamento oscilatório e amortecido característico do sistema infinito, como indicado em (3.28), até a manifestação de uma peculiaridade do sistema finito ausente no sistema infinito; isto é, a presença de reconstruções parciais da magnetização inicial, $\langle S_Q^z \rangle_0$. As reconstruções da magnetização inicial são menos pronunciadas quanto maior for o número de sítios. A quantificação de qual seja o número de sítios *suficientemente grande*, para que haja comportamento oscilatório e amortecido, depende do Hamiltoniano, do número de onda Q e dos parâmetros do Hamiltoniano. No exemplo mostrado na Figura 3.4 infere-se que o número 36 é suficientemente grande para $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$, mas não o é para $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$. Para $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$, 60 é suficiente. O número de sítios igual a 12 não é suficientemente grande para se perceber relaxação de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ nem de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$. Deve-se lembrar que essa dinâmica decorre do estado inicial descrito pelo operador densidade dependente de apenas uma componente do operador de spin, $\rho_0(S^z)$, e também decorre do Hamiltoniano XY(γ).

As reconstruções traduzem o fato de que um sistema finito não relaxa verdadeiramente. Uma condição necessária para haver relaxação é a existência de infinitos graus de liberdade no sistema físico. Outra

³Ao longo de todo o texto desta tese será feito um abuso de linguagem. O termo *magnetização* muitas vezes terá o significado de uma das componentes de Fourier da magnetização, $\langle S_Q^z \rangle_t$.

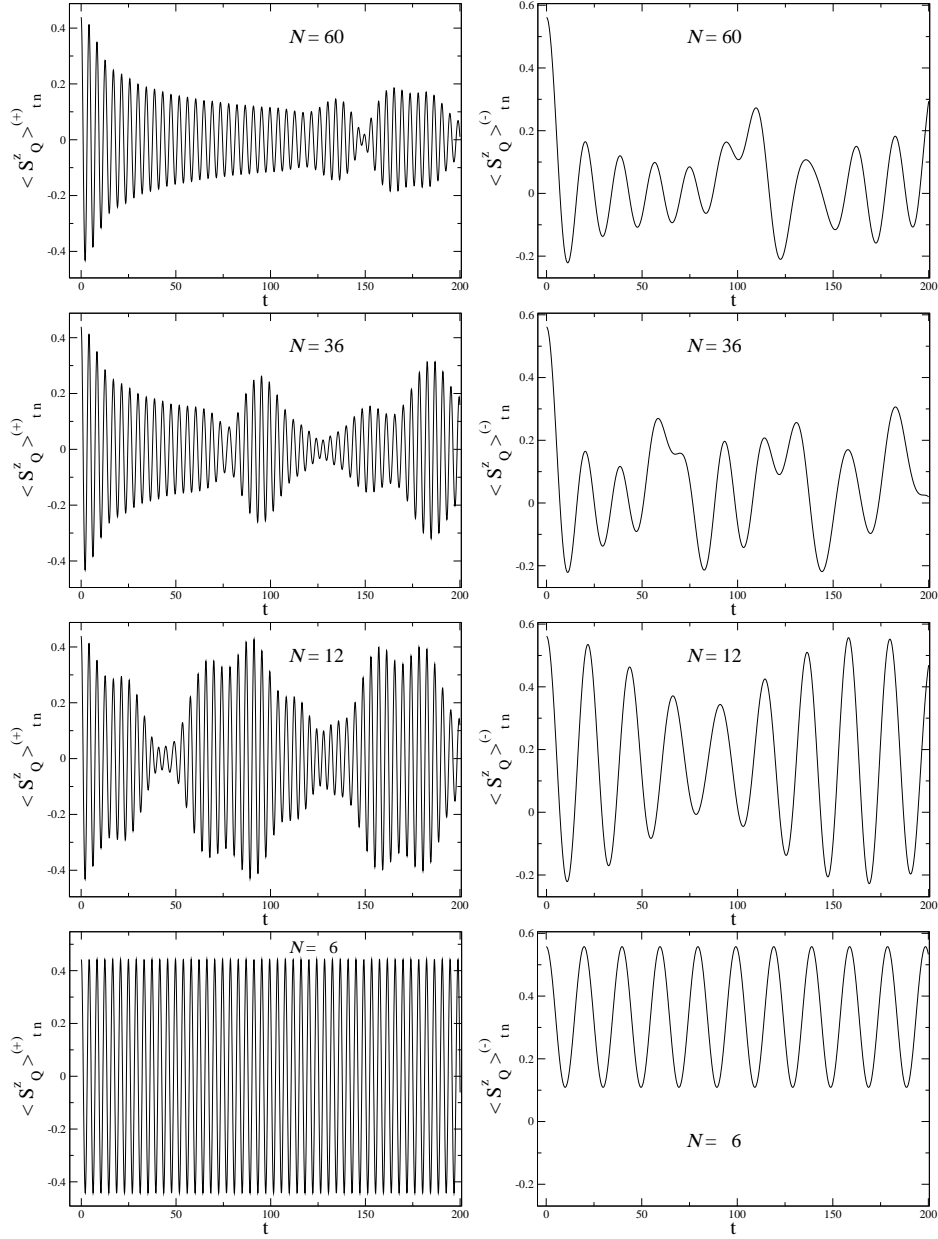


Figura 3.4: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ vs t (3.37) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ vs t (3.38). $N = 60, 36, 12, 6$, $\gamma = 0.6$, $Q = \frac{\pi}{3}$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. O tempo t est em unidades arbitrrias. Para $N = 60$ h dois tipos de reconstruo parcial da magnetizao: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ oscila com amplitudes maiores, e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ eleva-se acima de zero e em seguida volta a oscilar em torno de zero. Os tempos transcorridos at a primeira reconstruo seguem (3.42). O sistema pequeno com seis stios desenvolve evoluo peridica, reversvel, com frequncias de Rabi, e no relaxa.

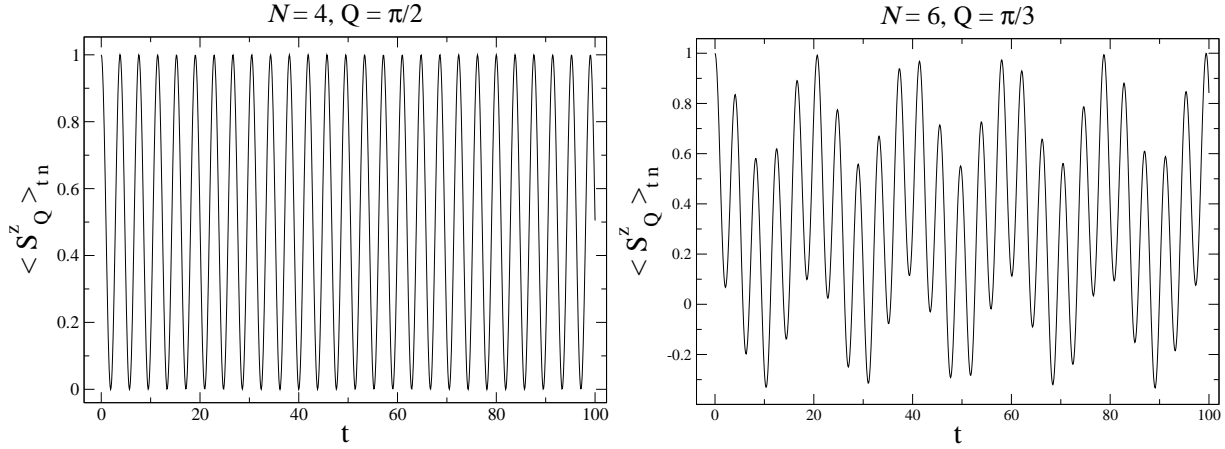


Figura 3.5: Freqüências de Rabi, $\langle S_Q^z \rangle_t$ vs t , $\gamma = 0.6$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) $N = 4$, $Q = \pi/2$. (b) $N = 6$, $Q = \pi/3$: esta função é a soma de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ apresentadas na Figura 3.4.

condição necessária para haver relaxação é que a evolução do estado inicial percorra todo o espaço de Hilbert do sistema, ou ainda que percorra apenas uma fração, que essa fração tenha dimensão infinita. O estado inicial precisa ser ‘arbitrário o suficiente’, deve corresponder a uma combinação linear ou a uma mistura estatística de infinitos auto-estados. Em um sistema infinito uma perturbação descrita por um estado arbitrário tende a distribuir-se pelos infinitos graus de liberdade do sistema e não retornar à configuração inicial. Em um sistema finito, mesmo com grande número de sítios, uma parte da configuração inicial é recriada em algum tempo posterior devido ao efeito de tamanho finito. O estado inicial não pode ser por exemplo uma superposição de dois auto-estados.

O resultado (3.28), seção 3.2.1, referente ao limite assintótico de sistema e tempo infinitos, mostrou que a condição de arbitrariedade do estado inicial é satisfeita pelos estados descritos pelo operador densidade dependente de apenas uma componente do operador de spin (3.12). Esse tipo de estado inicial também exibe tendência a relaxação no sistema finito até a primeira reconstrução parcial da magnetização. Um exemplo de processo de relaxação onde apenas uma fração dos estados do Hamiltoniano estão envolvidos é justamente a evolução dos modos longitudinais $\langle S_Q^z \rangle_t$ para o Hamiltoniano XY(γ), pois nesse caso os subespaços de S^z par e ímpar ficam desacoplados.

Reconstruções totais e Freqüências de Rabi

Reconstruções totais da magnetização inicial ocorrem em sistemas pequenos. As reconstruções totais da magnetização estão associadas à freqüências de Rabi, Figura 3.4 para $N = 6$ e Figura 3.5 para $N = 4$. Através da abordagem com cálculo numérico encontraram-se reconstruções totais para outros Hamiltonianos e outros estados iniciais, por exemplo, Figura 4.2.

De acordo com a Equação de Schrödinger, as superposições de dois auto-estados não relaxam. Não importa se o número de sítios do sistema é grande ou pequeno, ou se a dimensão de espaço total de estados é grande ou pequena. Um exemplo será mostrado através de cálculo numérico, na Figura 4.5, onde trataram-se cadeias com até 14 sítios com dinâmica dada pelo Hamiltoniano de Heisenberg no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z . Apesar de o sistema não ter muitos sítios, a dimensão do subespaço mencionado é grande, 3432.

Superposições de dois auto-estados poderiam relaxar se o sistema interagisse com um banho, e provavelmente seria um processo rápido.

Irreversibilidade vs Reversibilidade

Há dois conceitos distintos de reversibilidade. Um refere-se à possibilidade de o operador de evolução temporal do sistema, para um Hamiltoniano independente do tempo,

$$\mathbf{U}(t) = \exp \left(-i \frac{\mathcal{H}t}{\hbar} \right), \quad (3.40)$$

obedecer a,

$$(\mathbf{U}(t))^{-1} = \mathbf{U}(-t), \quad (3.41)$$

o que decorre da unitariedade do operador $\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}$. O outro conceito de reversibilidade diz respeito ao fato de a evolução temporal da grandeza de interesse, por exemplo a magnetização, retornar ao valor inicial indefinidamente a medida que o tempo transcorre. Trata-se de uma periodicidade. Esse segundo conceito será utilizado neste trabalho.

A relaxação é um processo irreversível. Em oposição a ela, as reconstruções totais associadas às frequências de Rabi caracterizam evolução reversível. São dois processos distintos que ocorrem em limites diferentes. Entre os dois casos extremos ocorrem os processos onde há tendência de relaxação até as reconstruções parciais. São processos irreversíveis, pois a magnetização inicial não é reestabelecida, porém, apresentam uma marca de reversibilidade que é a reconstrução parcial.

Em um sistema fechado, o processo de relaxação requer que a dimensão do espaço de estados acessíveis à dinâmica seja infinito, o que depende de duas condições: número infinito de sítios e estado inicial suficientemente arbitrário. As frequências de Rabi desenvolvem-se quando há poucos auto-estados acessíveis à dinâmica, o que é satisfeito ou em sistemas muito pequenos por diversos estados iniciais para certos valores dos parâmetros do Hamiltoniano, ou em sistemas grandes se o estado inicial for escolhido entre superposições muito particulares.

Coincidências até as primeiras reconstruções

Há uma característica notável das evoluções temporais de modos $\langle S_Q^z \rangle_t$, $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ definidos por certo número de onda Q que esteja contido em sistemas finitos com diferentes números de sítios

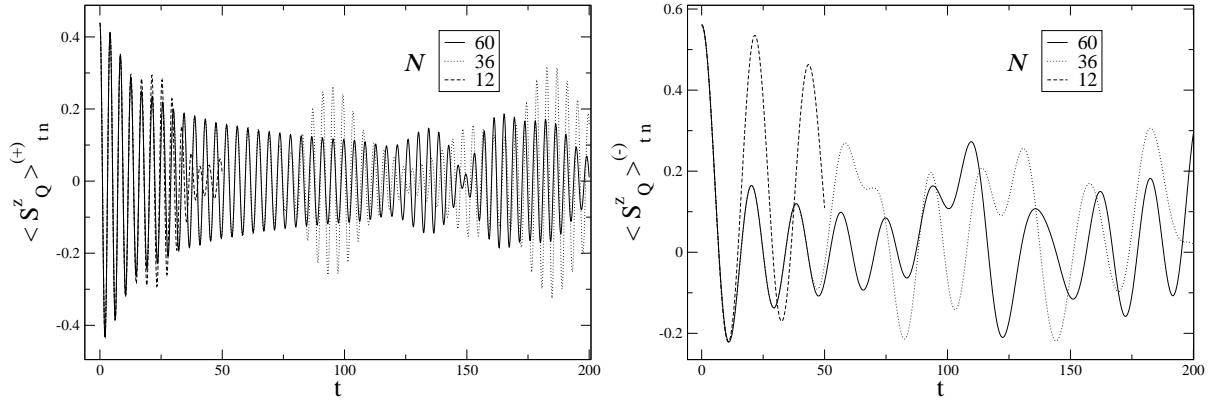


Figura 3.6: Coincidências para cadeias com números de sítios diferentes. Superposições de algumas funções mostradas na Figura 3.4. $N = 60, 36, 12$, $\gamma = 0.6$, $Q = \frac{\pi}{3}$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} vs t$ e (b) $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)} vs t$.

N , para o mesmo tipo de estado inicial $\rho_0(S^\alpha)$ (3.12) e para os mesmos valores dos parâmetros do Hamiltoniano. Tais evoluções coincidem entre si desde o instante inicial até a ocorrência da primeira reconstrução parcial do modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ no sistema com menor número de sítios. Essas coincidências constituem uma garantia de que cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ em um sistema finito comporta-se, até a ocorrência da primeira reconstrução parcial da magnetização, da mesma maneira que no sistema infinito, Figura 3.6.

Coincidências semelhantes entre as evoluções em sistemas com número de sítios diferentes verificam-se para algumas grandezas que quantificam emaranhamento, Figuras 5.4 e 5.5, e para outras grandezas que quantificam a distância entre o estado evoluído no tempo e o estado inicial, Figura 4.25, quando a dinâmica é gerada pelo Hamiltoniano XXZ a partir de um estado inicial do tipo produto direto contido no subespaço de uma onda de spin.

Se por um lado as considerações sobre as coincidências entre as evoluções temporais geradas pelos Hamiltonianos $XY(h, \gamma)$ e $XY(\gamma)$ são válidas quando o estado inicial é da forma $\rho_0(S^\alpha)$, por outro lado, o tempo transcorrido até a primeira reconstrução pode depender do estado inicial ou mesmo não estar definido. Essas diferenças serão notadas no próximo Capítulo. Por exemplo, para o Hamiltoniano XXZ, estados do tipo produto direto em cada um dos subespaços de uma e de duas ondas de spin desenvolvem evoluções distintas e apresentam tempos de reconstrução distintos, para $\Delta \neq 0$, e no subespaço de uma onda, não se define uma reconstrução para os estados do tipo $|W_N^{fa}\rangle$, pois para eles $\langle S_Q^z \rangle_0 = 0$, Figura 4.11.

Tempos transcorridos até as primeiras reconstruções

Quanto maior o número de sítios da cadeia, maiores serão os tempos t_r^+ e t_r^- transcorridos até as primeiras reconstruções parciais associadas respectivamente a $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$. Ambos tempos de

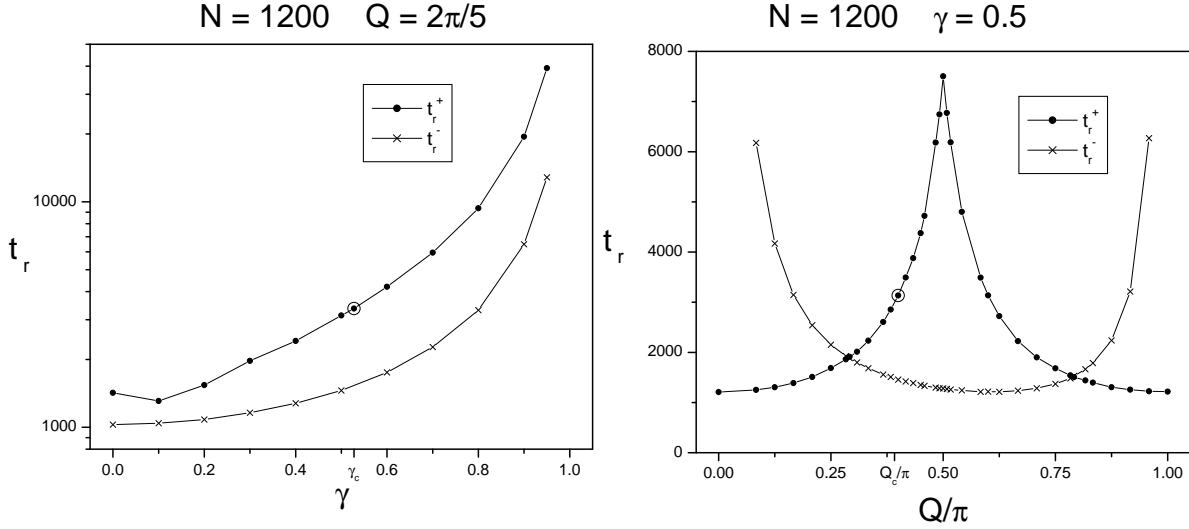


Figura 3.7: Tempos transcorridos até a primeira reconstrução parcial de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ (3.37) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38). $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. Os tempos t_r estão em unidades arbitrárias. (a) t_r^\pm vs γ para $Q = \frac{2\pi}{5}$, (b) t_r^\pm vs Q para $\gamma = 0.5$. O tempo de reconstrução t_r^+ não apresenta um valor especial, máximo ou mínimo, para os valores críticos γ_c e Q_c , os quais foram calculados a partir da expressão válida para o sistema infinito (3.30). As Figuras (a) e (b) apresentam analogias com as Figuras 3.25 (a) e (b).

reconstrução t_r^\pm aumentam linearmente com o número de sítios N da cadeia,

$$t_r^\pm(N, Q, \Upsilon) = \varphi^\pm(Q, \Upsilon) N, \quad (3.42)$$

onde Υ indica os parâmetros do Hamiltoniano.

As funções $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ em geral apresentam tempos de reconstrução diferentes, Figura 3.7. Além disso, as formas das reconstruções de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ são diferentes, Figura 3.4. Essa Figura mostra que na reconstrução parcial $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ continua oscilando em torno de zero porém com amplitude maior, enquanto $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ oscila acima de zero e em seguida volta a oscilar em torno de zero.

A Figura 3.7 mostra que o aumento da anisotropia γ corresponde ao aumento dos tempos de reconstrução parcial t_r^\pm . O Hamiltoniano apresenta ‘menos’ dinâmica quando se aproxima do limite Ising, $\gamma = 1$. A evolução temporal de um estado quântico em um sistema fechado decorre da não comutatividade das componentes do spin envolvidas no Hamiltoniano. No limite Ising há apenas uma componente. Por outro lado, o fato de haver ‘menos’ dinâmica nas proximidades do limite Ising não está associado aos processos de relaxação crítica mais lenta. A Figura 3.7 mostra que não há uma relação especial entre os valores Q_c ou γ_c associados à criticalidade do sistema infinito, e o tempo de reconstrução t_r^+ .

É evidente que o tempo de reconstrução t_r de $\langle S_Q^z \rangle_t$ é igual ao menor tempo entre t_r^+ e t_r^- .

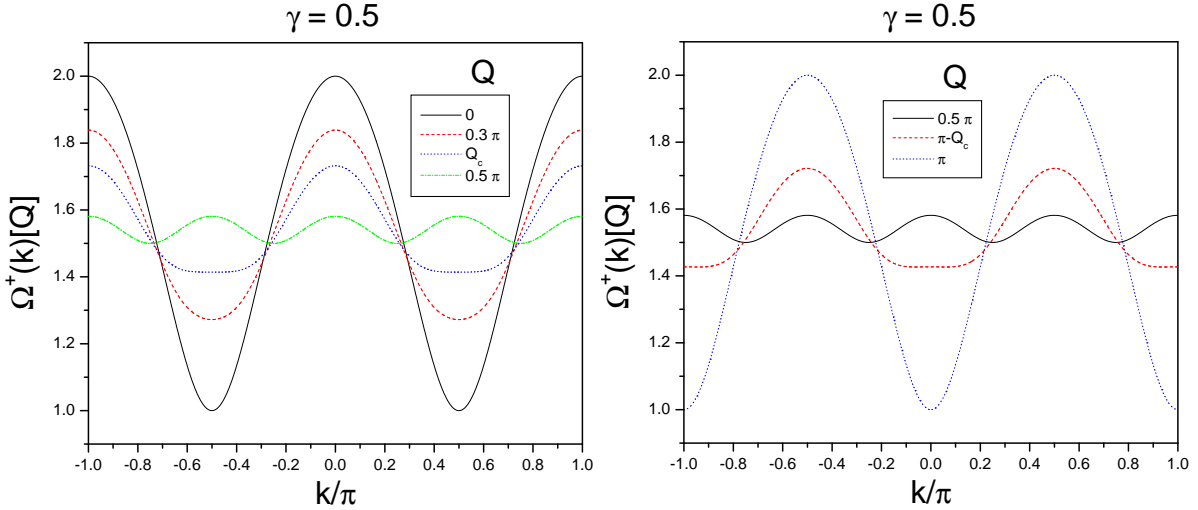


Figura 3.8: Ω^+ vs k . $N = 1200$, $\gamma = 0.5$. $Q = 0, 0.3\pi, Q_c, 0.5\pi, \pi - Q_c, \pi$. $Q_c = 0.3918\dots\pi$ é o valor crítico correspondente a $\gamma = 0.5$ para o sistema infinito (3.30). Para Q_c os PE degenerados são o_3^+ , o_4^+ e o_5^+ , (3.29), os quais coincidem em $\pm\frac{\pi}{2}$. Para $\pi - Q_c$ os PE degenerados são o_1^+ , o_2^+ e o_3^+ , (3.29), os quais coincidem em $0, \pi$.

3.3.2 Criticalidade da Relaxação da Magnetização

A procura pela marca da criticalidade do sistema infinito no sistema finito foi feita em dois objetos diferentes, por um lado na função Ω^+ (3.22), e por outro nas evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ através de ajustes nas suas envolventes com a forma de lei de potência. Os resultados dos ajustes no sistema finito com 1200 sítios estão em bom acordo com os resultados analíticos para o sistema infinito.

Ω^+ e Ω^- em função de k

A criticalidade da relaxação da magnetização do Hamiltoniano XY(γ) está ligada aos pontos estacionários degenerados de Ω^+ na variável k , (3.32). Quando há degenerescência dos pontos estacionários, Ω^+ apresenta valores aproximadamente constantes em uma região do domínio de k mais ‘larga’ do que quando não há tal degenerescência.

Para o sistema finito foram inspecionados os gráficos de Ω^+ vs k correspondentes a diferentes Q , Figura 3.8, e determinou-se o número de onda Q mais próximo da condição de degenerescência. Ω^- não tem pontos estacionários degenerados. De fato na Figura 3.9 as curvas não apresentam valores aproximadamente constantes em uma região larga do domínio de k . Em contraste com o Hamiltoniano XY(γ), para o Hamiltoniano XY(h, γ) Ω^- tem PED, seção 3.4.2.

A degenerescência dos PE de Ω^+ , o_3^+ , o_4^+ e o_5^+ , (3.29), é caracterizada por derivadas superiores nulas até terceira ordem em relação a k calculadas nos pontos críticos (γ_c, Q_c) , (3.32), Figura 3.10.

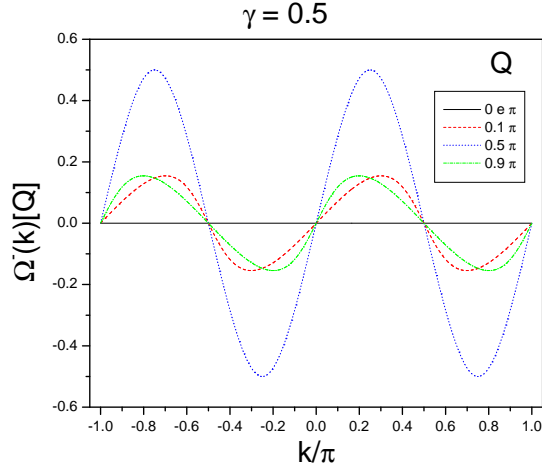


Figura 3.9: Ω^- vs k . $\gamma = 0.5$. $Q = 0, 0.1\pi, 0.5\pi, \pi$.

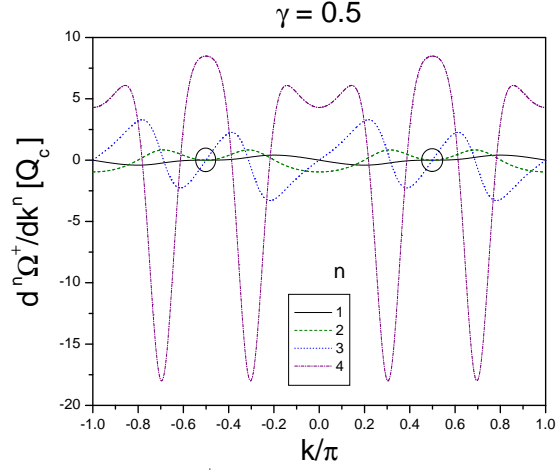


Figura 3.10: $\frac{\partial^n \Omega^+}{\partial k^n}$ vs k . $N = 1200$, $\gamma = 0.5$, $Q = Q_c$, $n = 1, 2, 3, 4$. Os círculos indicam os PE degenerados $k_e^{(3)}$, degenerescências de o_3^+ , o_4^+ e o_5^+ , (3.29), os quais são sempre $\pm \frac{\pi}{2}$ para Q_c . As expressões analíticas das derivadas de Ω^+ não estão em [4]. Comunicação pessoal.

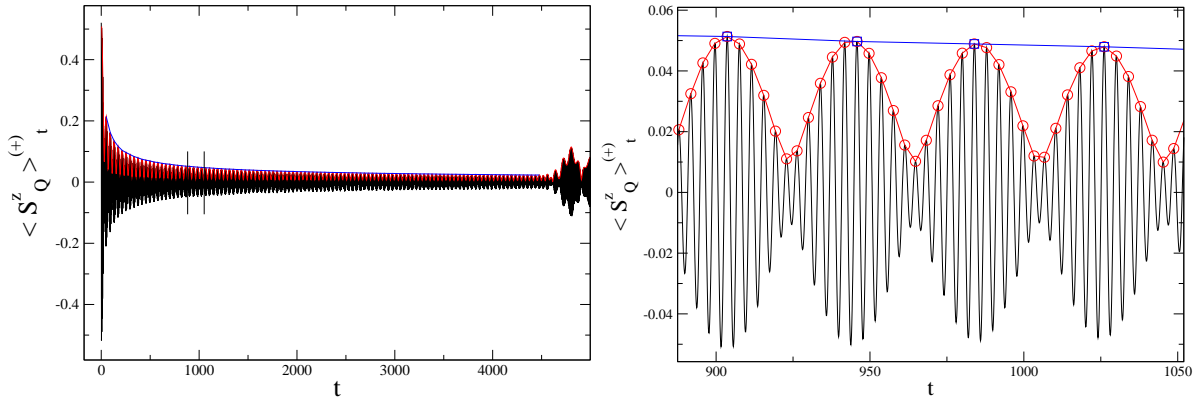


Figura 3.11: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ vs k . $N = 1200$, $\gamma = 0.5$, $Q = \frac{325}{600}\pi$. A envolvente ‘superior’ é monotonicamente decrescente. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) Evolução desde o início até a primeira reconstrução parcial. (b) Detalhe.

Ajustes com lei de Potência

O amortecimento de cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ em um sistema finito foi analisado desde o início da evolução até a primeira reconstrução parcial. As envolventes ‘superiores’ de $\langle S_Q^z \rangle_t$, $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ foram selecionadas através do procedimento ilustrado na Figura 3.11. Cada função foi calculada em uma sequência discreta de valores da variável $t = n \delta t$, com $\delta t = 0.1$ e $n = 0, 1, 2, \dots$. Tomaram-se os máximos locais das

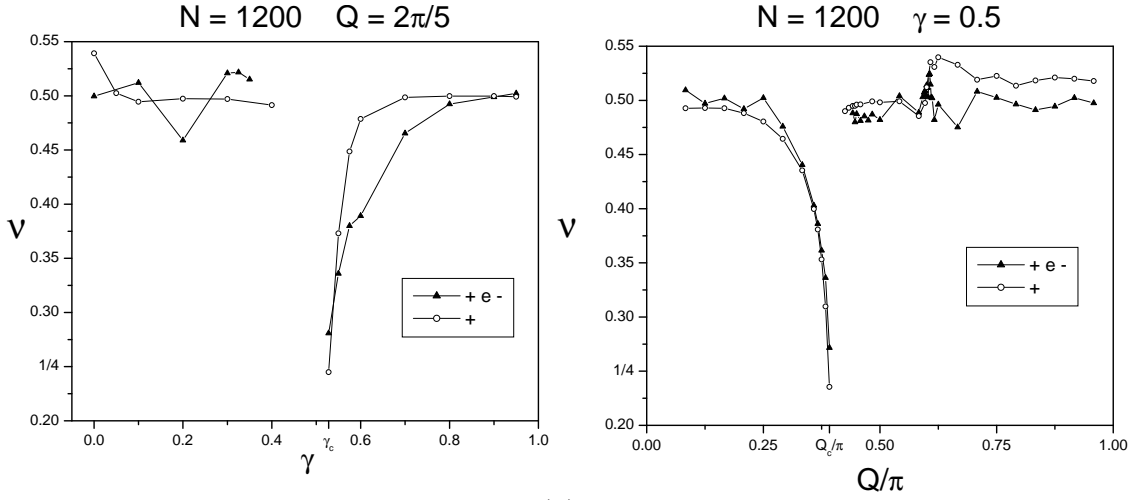


Figura 3.12: Ajustes de ν e ν^+ em $\langle S_Q^z \rangle_t$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $Q = \frac{2\pi}{5}$, ν vs γ e ν^+ vs γ . (b) $\gamma = 0.5$, ν vs Q e ν^+ vs Q .

funções e em seguida os máximos locais dos máximos locais. A envolvente exibida é monotonicamente decrescente. Para a maioria dos números de onda Q e valores dos parâmetros dos Hamiltonianos $XY(h, \gamma)$ e $XY(\gamma)$, as envolventes são bem ajustadas por uma lei de potência com dois parâmetros livres, ν e τ ,

$$y(t) = (t/\tau)^{-\nu}. \quad (3.43)$$

Essa forma de ajuste foi inspirada na expressão (3.28). Foram feitos ajustes em duas amostragens, para cada uma das funções $\langle S_Q^z \rangle_t$, $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$. Em uma amostragem geraram-se funções com mesmo número de onda $Q = \frac{2\pi}{5}$ e com diferentes valores do parâmetro γ do Hamiltoniano. Na outra amostragem geraram-se funções com mesmo parâmetro $\gamma = 0.5$ e com diferentes valores de Q . Os ajustes para ν e τ estão apresentados nas Figuras 3.12, 3.13, 3.14 3.15 e 3.16.

Em cada uma das amostragens mencionadas manifesta-se uma marca da criticalidade da relaxação do sistema infinito nos ajustes feitos para $\langle S_Q^z \rangle_t$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$. Tal marca corresponde ao valor próximo de $\frac{1}{4}$ para o ajuste do expoente ν e à tendência de divergência dos valores ajustados para o parâmetro τ , quando γ está próximo de γ_c ou Q de Q_c . Para os demais valores de γ ou Q os valores ajustados do expoente ν aproximam-se de $\frac{1}{2}$. A Figura 3.12 exhibe ajustes de ν e ν^+ para $\langle S_Q^z \rangle_t$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$, respectivamente, compatíveis com a Figura 3.2. A Figura 3.13 exhibe ajustes de ν^- para $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$. Como esperado, as funções $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ não desenvolvem nenhuma criticalidade.

Foram comparados os inversos dos valores ajustados para τ , τ^+ e τ^- para cada uma das funções: $\langle S_Q^z \rangle_t$, $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$, referentes a cadeias finitas, com os módulos das correspondentes derivadas segundas de Ω^\pm em relação a k , (3.33), calculadas nos pontos estacionários (3.29). Tais derivadas correspondem a cadeias infinitas no limite de tempo infinito. Para o caso de $\langle S_Q^z \rangle_t$ os inversos dos valores ajustados para τ em geral são menores que os valores de todas as derivadas segundas de Ω^\pm , Figura 3.14.

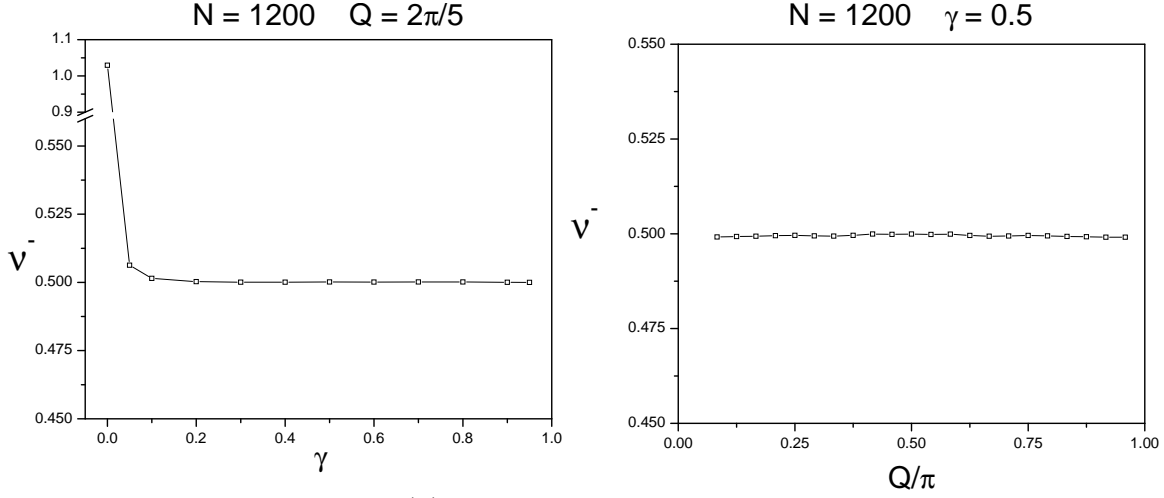


Figura 3.13: Ajustes de ν^- em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $Q = \frac{2\pi}{5}$, ν^- vs γ . (b) $\gamma = 0.5$, ν^- vs Q .

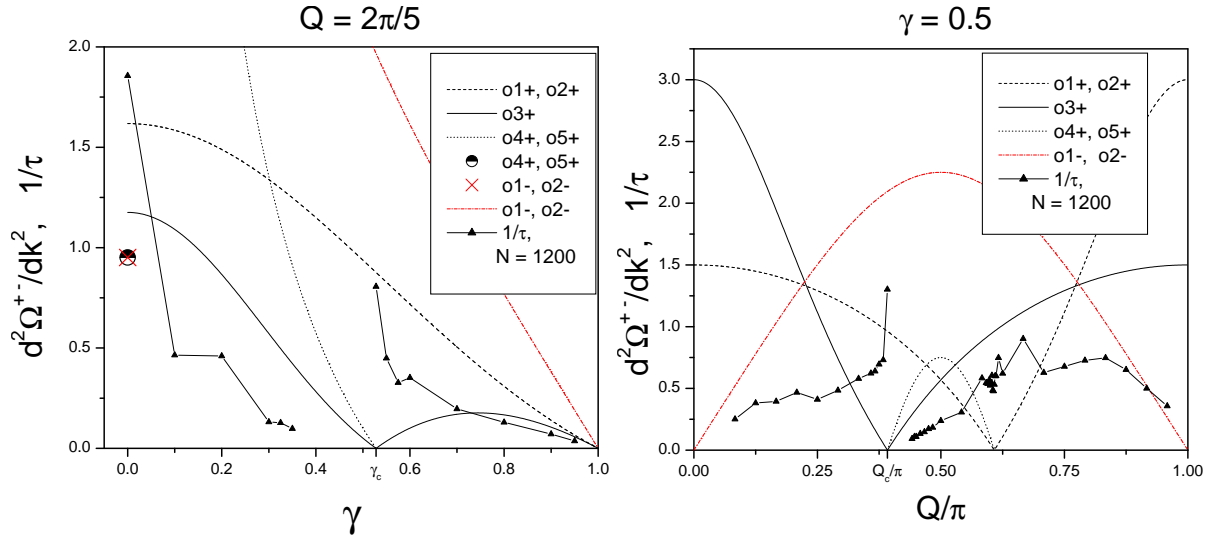


Figura 3.14: Ajustes de τ em $\langle S_Q^z \rangle_t$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $Q = \frac{2\pi}{5}$, $\frac{1}{\tau}$ vs γ e $\left. \frac{\partial^2 \Omega^\pm}{\partial k^2} \right|_{k=k_e}$ vs γ . (b) $\gamma = 0.5$, $\frac{1}{\tau}$ vs Q e $\left. \frac{\partial^2 \Omega^\pm}{\partial k^2} \right|_{k=k_e}$ vs Q . $k_e = o_1^+, o_2^+, o_3^+, o_4^+, o_5^+, o_1^-$ e o_2^- (3.29).

Observam-se discrepâncias quando γ aproxima-se de γ_c pela direita ou Q de Q_c pela esquerda. Nessas vizinhanças $1/\tau^+$ cresce ao invés de tender a zero, (3.34). Esse tipo de discrepância também foi observado na Figura 3.15 e na Figura 3.27 a qual corresponde ao Hamiltoniano XY(h, γ), seção 3.4.2.

Há boa compatibilidade entre os inversos dos ajustes de τ^+ e o módulo da derivada segunda de Ω^+ associada ao PE $o_3^+ = \frac{\pi}{2}$, para quase todos os valores de Q ou de γ , Figura 3.15. Como já foi mencionado, há discrepâncias quando γ aproxima-se de γ_c pela direita ou Q de Q_c pela esquerda. A comparação entre os ajustes numéricos e as expressões analíticas para τ^- , exibe boa compatibilidade quando se fixa Q e se

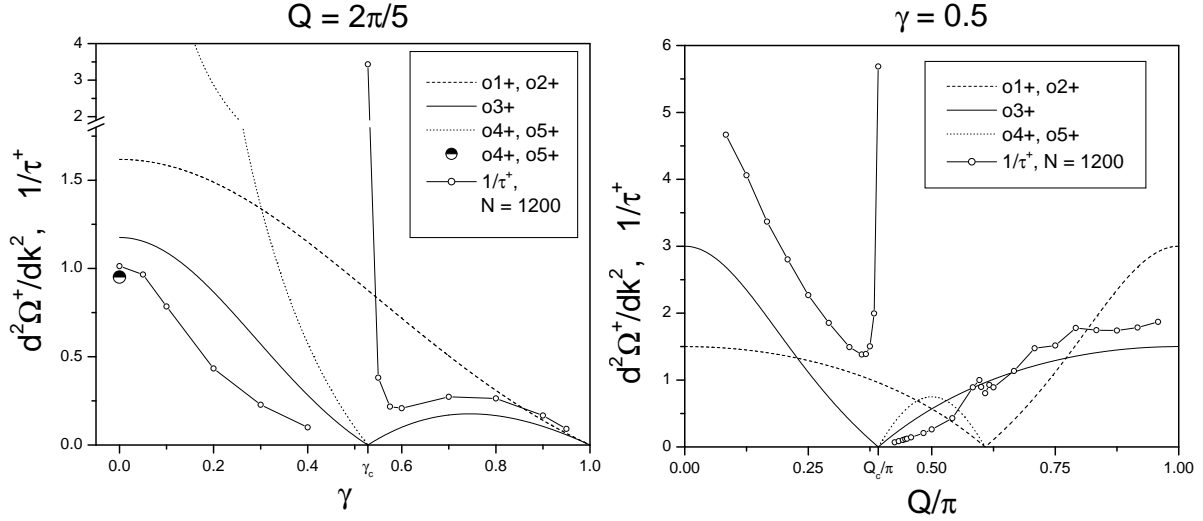


Figura 3.15: Ajustes de τ^+ em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $Q = \frac{2\pi}{5}$, $\frac{1}{\tau^+}$ vs γ e $\left. \frac{\partial^2 \Omega^+}{\partial k^2} \right|_{k=k_e}$ vs γ . (b) $\gamma = 0.5$, $\frac{1}{\tau^+}$ vs Q e $\left. \frac{\partial^2 \Omega^+}{\partial k^2} \right|_{k=k_e}$ vs Q . $k_e = o_1^+, o_2^+, o_3^+, o_4^+$ e o_5^+ , (3.29).

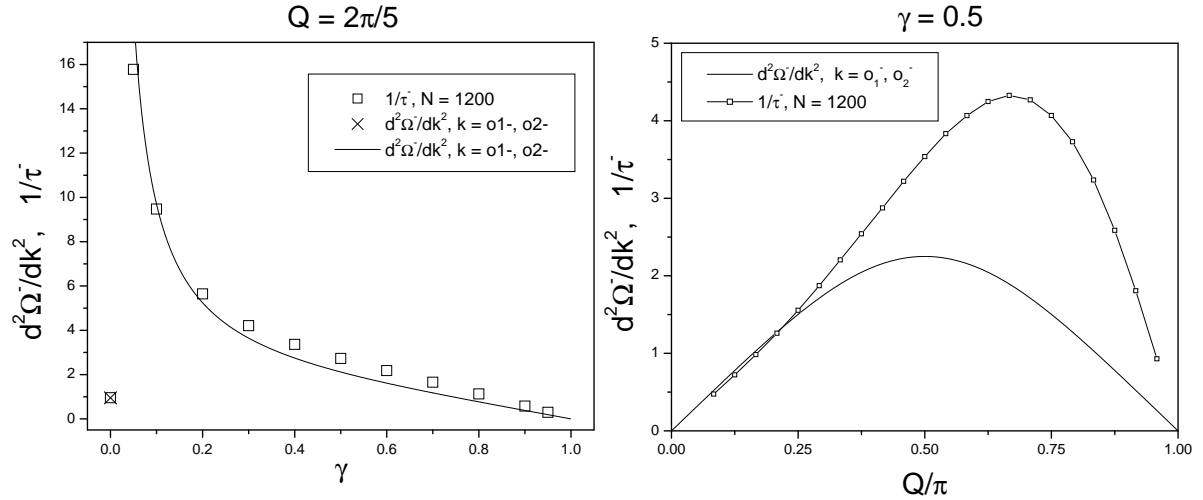


Figura 3.16: Ajustes de τ^- em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $Q = \frac{2\pi}{5}$, $\frac{1}{\tau^-}$ vs γ e $\left. \frac{\partial^2 \Omega^-}{\partial k^2} \right|_{k=k_e}$ vs γ . (b) $\gamma = 0.5$, $\frac{1}{\tau^-}$ vs Q e $\left. \frac{\partial^2 \Omega^-}{\partial k^2} \right|_{k=k_e}$ vs Q . $k_e = o_1^-$ e o_2^- , (3.29).

varia γ . Há compatibilidade inclusive para o salto descontínuo em $\gamma = 0$. Por outro lado, não é grande a compatibilidade quando se fixa γ e se varia Q , apenas as formas das curvas são parecidas, Figura 3.16.

Uma possível causa para as discrepâncias nos ajustes de τ e τ^+ quando $1/\tau$ e $1/\tau^+$ deveriam tender a zero ao invés de crescer, Figuras 3.14 e 3.15, pode vir do fato de os ajustes de τ e τ^+ dependerem exponencialmente de $\frac{1}{\nu}$ e $\frac{1}{\nu^+}$. Tomando-se o logarítmo da expressão (3.43),

$$\ln y(t) = -\nu \ln t + \nu \ln \tau, \quad \text{e portanto,} \quad \tau = e^{\frac{1}{\nu} \ln y(1)}. \quad (3.44)$$

Os ajustes de ν não apresentaram resultados inesperados, o que é razoável pois resultam simplesmente da determinação de coeficientes angulares. Os ajustes de τ porém, estão mais sujeitos a erros. O valor ajustado para ν decresce de cerca de $\frac{1}{2}$ para cerca de $\frac{1}{4}$ na região onde τ deveria apresentar tendência de divergência, o que pode ser verificado comparando-se as Figuras 3.12 e 3.14 e as Figuras 3.12 e 3.15. O efeito de diminuição da tendência da relaxação pode estar sendo descrito pelo ajuste numérico como diminuição de ν ao invés de aumento de τ .

Na amostragem para γ fixo os expoentes ajustados ν e ν^+ ficam em torno de $\frac{1}{2}$ ao redor de $\pi - Q_c$. Há apenas um ligeiro aumento de ν^+ , Figura 3.12 (b), possivelmente indicando a presença do PE degenerado associado ao expoente $\frac{3}{4}$. Não se percebe o salto de $\frac{3}{4}$ para $\frac{3}{2}$ nesse PE degenerado, por causa da presença de outros PE associados ao expoente $\frac{1}{2}$, como discutido na página 36.

Batimentos

As funções $\langle S_Q^z \rangle_t$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ apresentam batimentos para Q fixo quando γ está à esquerda de γ_c ou para γ fixo quando Q está à direita de Q_c . Por exemplo para γ fixo, a Figura 3.17 mostra batimentos de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ para $Q = \frac{250}{600}\pi$ e $Q = \frac{265}{600}\pi$, ambos maiores que — à direita de — $Q = \frac{240}{600}\pi$, Q_c . Os batimentos são atribuídos à aproximação dos PE o_3^+ , o_4^+ e o_5^+ (3.29) nas proximidades do ponto crítico (γ_c, Q_c) . Os módulos das derivadas segundas de Ω^+ calculadas nesses PE também aproximam-se, Figura 3.15. As frequências de oscilação associadas a cada PE provavelmente também aproximam-se, o que origina os batimentos. Quando γ ou Q estão respectivamente em uma estreita vizinhança à esquerda de γ_c ou à direita de Q_c , o período do batimento aumenta e torna-se comparável ao tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial da magnetização, Figura 3.17, $Q = \frac{250}{600}\pi$. Isso impede que se defina uma envolvente em tais estreitas vizinhanças, e então não se fazem ajustes para os parâmetros ν e τ . À direita de γ_c ou à esquerda de Q_c não existem os PE o_4^+ e o_5^+ , Figura 3.15, e não há batimentos, Figura 3.17, $Q = \frac{1}{3}\pi$.

Há um batimento muito discreto nas proximidades de $(\gamma_c, \pi - Q_c)$, Figura 3.18. Pode ser uma tênue indicação do salto de $\frac{3}{2}$ para $\frac{3}{4}$, descrito na página 36.

3.4 $XY(h, \gamma)$ Finito

Nesta seção analisar-se-á o comportamento da relaxação da magnetização segundo a dinâmica promovida pelo Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$, com $0 < h < 1$ e $\gamma > 0$ simultaneamente. Não se conhece a relaxação da magnetização no limite assintótico da cadeia infinita em tempo infinito, através do tratamento analítico do método da Fase Estacionária, para esse Hamiltoniano. Serão analisadas as soluções analíticas para sistemas finitos correspondentes ao estado inicial $\rho_0(S^z)$, (3.20), e aos estados iniciais $\rho_0(S^x)$ e $\rho_0(S^y)$, cujas expressões estão na dissertação [4]. Emergem criticalidades muito semelhantes a partir de qualquer

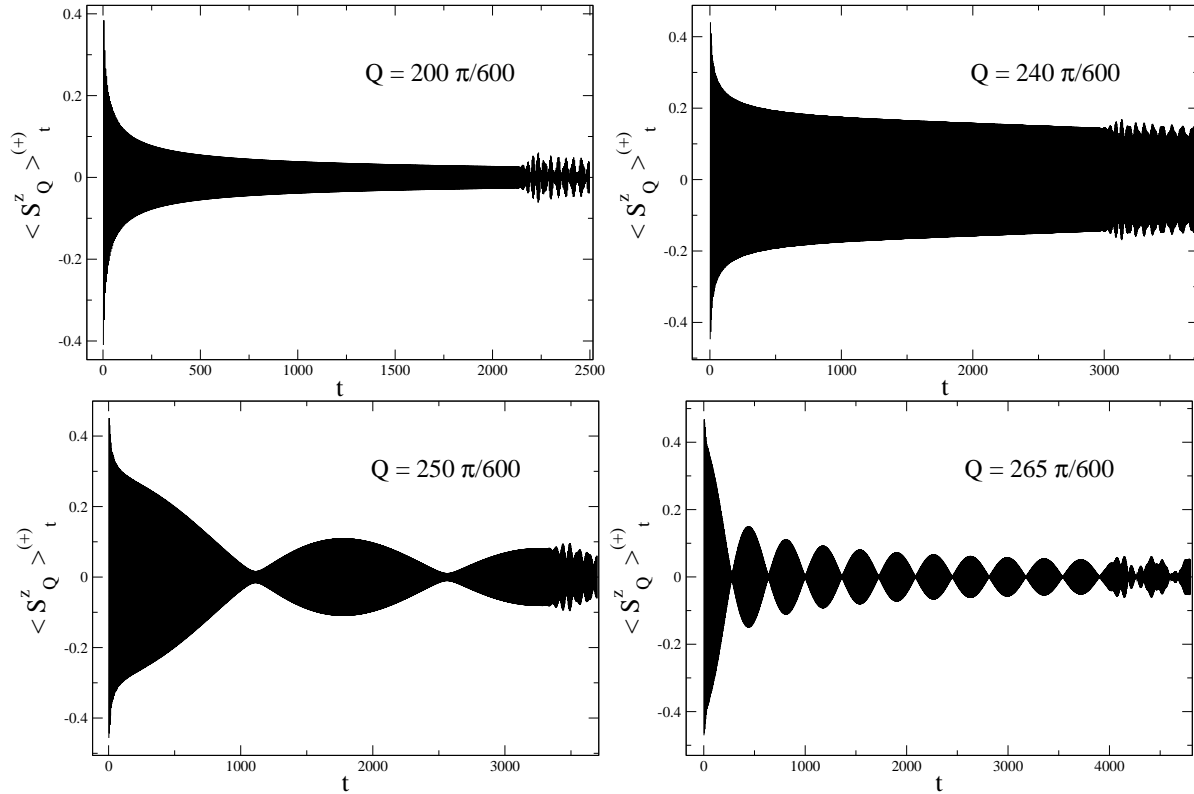


Figura 3.17: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ vs t (3.37). $N = 1200$, $\gamma = 0.5$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. $Q = \frac{\pi}{3}$. $Q = \frac{240}{600}\pi$, corresponde ao modo $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ que oscila com maior amplitude que os outros modos; sob esse critério é o modo que mais se assemelha ao modo crítico Q_c do sistema infinito, porém há uma pequena diferença $Q_c(\gamma = 0.5) \approx \frac{235.1}{600}\pi$ (3.30). $Q = \frac{250}{600}\pi$, batimentos, não se define uma envolvente e não se fazem ajustes de ν e τ . $Q = \frac{265}{600}\pi$. O tempo t está em unidades arbitrárias. Essas funções são análogas àquelas da Figura 3.20.

um desses três estados. Serão apresentados somente os resultados referentes a $\rho_0(S^z)$. A marca da criticidade do sistema infinito presente no sistema finito foi detectada de duas maneiras. Inspeccionando-se as formas das funções $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$, e através de ajustes definidos por uma lei de potência nas envolventes dessas funções. Essas duas maneiras serão tratadas nas próximas duas seções.

3.4.1 Criticalidades: inspeção das formas das funções $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$

Foram identificados dois tipos de criticidade da relaxação da magnetização. Designar-se-á por criticidade do tipo (A), aquela caracterizada pela oscilação de um modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ ao redor de um patamar não nulo, a partir do início da relaxação, quando o número de onda Q está próximo de um valor crítico Q_A , Figura 3.19. Tal criticidade não emerge para quaisquer valores dos parâmetros h e γ . É análoga

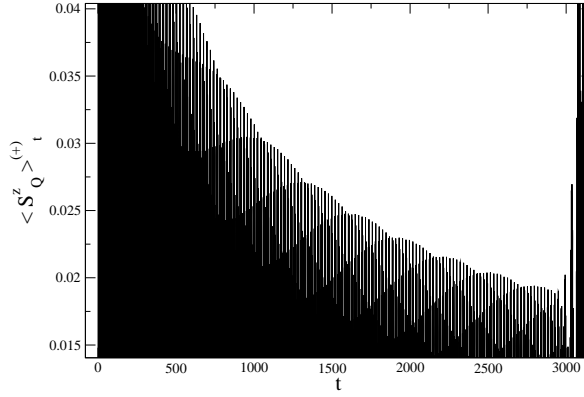


Figura 3.18: Batimento tênue. $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} vs t$ (3.37), detalhe. $N = 1200$, $\gamma = 0.5$, $Q = \frac{359}{600}\pi \sim \pi - Q_c$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. $\langle S_Q^z \rangle_{t=0}^{(+)} = 0.548$. O tempo t está em unidades arbitrárias.

à criticalidade desenvolvida pela dinâmica promovida pelo Hamiltoniano XX que inclui interações entre segundos vizinhos, no subespaço de uma onda de spin, a partir do estado inicial do tipo produto direto (4.39), seção 4.4.2. Designar-se-á por criticalidade do tipo (B), aquela onde o modo $\langle S_Q^z \rangle_t$, cujo número de onda esteja próximo de um valor crítico Q_B , oscila ao redor de zero, porém com uma amplitude maior que os modos cujos Q não estejam próximos de Q_B , Figura 3.20. É análoga a criticalidade do modelo $XY(\gamma)$.

Os tipos de criticalidade (A) e (B) estão associados às parcelas $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ (3.37) de $\langle S_Q^z \rangle_t$ (3.20), envolvendo as frequências Ω^- e Ω^+ (3.22), respectivamente. As evoluções de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ foram analisadas separadamente. Alguns modos estão exibidos nas Figuras 3.19 e 3.20, respectivamente. Embora as criticalidades associadas a $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ tenham sido analisadas separadamente, elas também estão associadas a $\langle S_Q^z \rangle_t$. A ocorrência da criticalidade do tipo (A) é entendida como sendo a manifestação de *nesting*. Não se descobriu a qual processo está associado à criticalidade do tipo (B), no Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$.

Criticalidade do tipo (A) e o Patamar de Oscilação

A ocorrência da criticalidade do tipo (A), Figura 3.19, emerge quando há dois vales na curva de dispersão, os quais surgem simetricamente em relação ao ponto com $k = 0$. Não emerge quando não surgem esses vales ou se seus mínimos tomam a forma de um ‘bico’; isto é, quando nesses mínimos a derivada primeira é descontínua, o que ocorre se $\gamma = 0$ e $h < 1$. A Figura 3.21 e a Tabela 3.3 mostram a correlação entre os vales sem bicos e a criticalidade. O surgimento dos vales e a localização de seus mínimos dependem de ambos parâmetros h e γ , Figura 3.22. Os vales surgem somente na presença de *gap*. Porém, também há presença de *gap* em certas situações onde não surgem os vales.

O patamar não nulo que caracteriza a criticalidade do tipo (A) cai com o transcorrer do tempo,

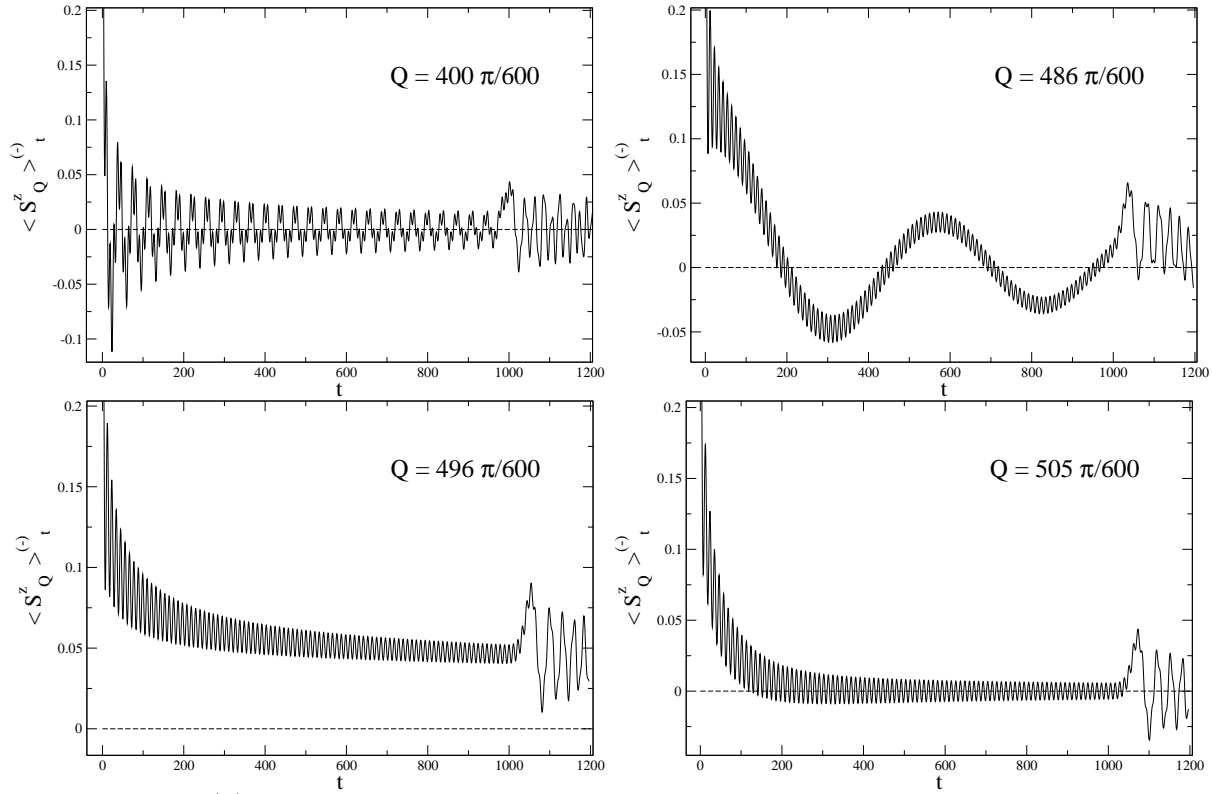


Figura 3.19: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ vs t (3.38), detalhes. $N = 1200$, $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. $Q = \frac{2}{3}\pi$, relaxação usual com $\nu \sim \frac{1}{2}$. $Q = \frac{486}{600}\pi$, batimentos, não se define uma envolvente e não se fazem ajustes de ν e τ . $Q = \frac{496}{600}\pi$, corresponde ao modo $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ que oscila ao redor de um patamar acima de zero mais alto que qualquer outro modo; sob esse critério é o modo que mais se assemelha ao modo crítico Q_A do sistema infinito. $Q = \frac{505}{600}\pi$, relaxação rápida, a envolvente não define uma lei de potência nem exponencial. O tempo t está em unidades arbitrárias. Esta figura apresenta analogias com a Figura 4.17.

Figura 3.19 para $Q = \frac{496}{600}\pi$. Apesar da tendência de queda, para sistemas com até 1200 sítios, o patamar de oscilação permanece acima de zero até a primeira reconstrução parcial. Esse patamar não nulo não decorre de uma parcela constante da expressão de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38), decorre de algumas parcelas de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ cujos períodos de oscilação são, pelo menos para $N = 1200$, maiores que o tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial. Tais parcelas de baixas frequências são diferenças entre energias próximas, associadas a pares de auto-estados, onde um auto-estado está situado em um dos vales da curva de dispersão, e o outro auto-estado no outro vale. A diferença de momento entre os mínimos dos dois vales, $2Q_{mv}$ ou $2\pi - 2Q_{mv}$, Figura 3.21, define o número de onda crítico $2\pi - Q_A$ ou Q_A . Há uma alta ‘densidade’ de parcelas na expressão de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ associadas às baixas frequências. Essa alta ‘densidade’ é uma marca no sistema finito da existência de *nesting* no sistema infinito. É notável que os valores de $2Q_{mv}$ inferidos a partir das curvas de dispersão, Figura 3.22, coincidam muito bem com os valores de

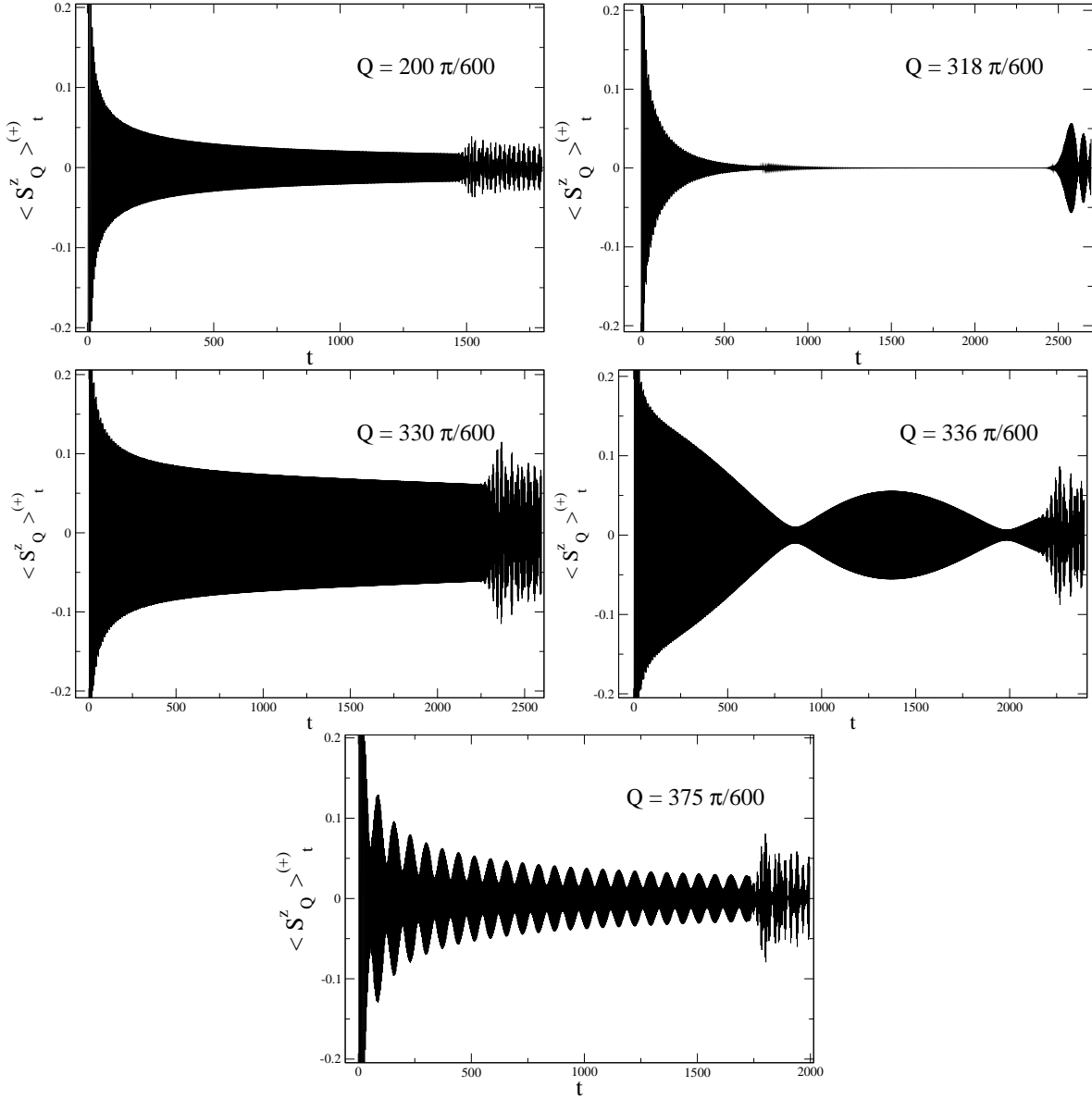


Figura 3.20: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ vs t (3.37), detalhes. $N = 1200$, $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. $Q = \frac{\pi}{3}$. $Q = \frac{318}{600}\pi$, relaxação rápida, a envolvente não define uma lei de potência nem exponencial. $Q = \frac{330}{600}\pi$, corresponde ao modo $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ que oscila com maior amplitude que os outros modos; sob esse critério é o modo que mais se assemelha ao modo crítico Q_B do sistema infinito. $Q = \frac{336}{600}\pi$, batimentos, não se define uma envolvente e não se fazem ajustes de ν e τ . $Q = \frac{375}{600}\pi$. O tempo t está em unidades arbitrárias. Essas funções são análogas às da Figura 3.17.

$2\pi - Q_A$ inferidos a partir das funções $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$, Tabela 3.3. As dependências dos Q críticos com o campo h para alguns valores da anisotropia γ estão exibidas na Figura 3.23. O campo externo h é uma grandeza

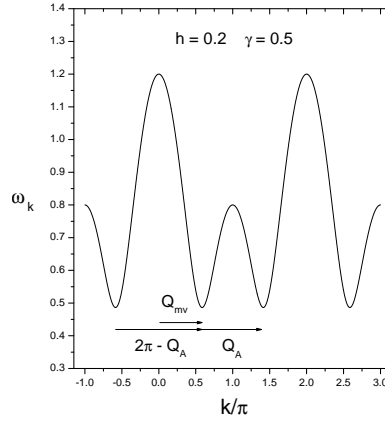


Figura 3.21: Vales da Curva de Dispersão (3.17) e criticalidade do tipo (A). A relação entre Q_{mv} e Q_A está indicada na Tabela 3.3.

mais facilmente manipulável que a anisotropia γ .

Nesta seção há abusos de notação e de linguagem, pois se usam os símbolos dos números de onda críticos Q_A e Q_B , os quais somente são definidos nos sistemas infinitos, para designarem números de onda em sistemas finitos, onde constituem uma marca da criticalidade do sistema infinito no finito. A rigor não há criticalidade nos sistemas finitos.

Há que se verificar o seguinte aspecto. No limite da cadeia infinita e de tempos longos, o modo $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ correspondente ao número de onda Q_A ainda oscila ao redor de um patamar não nulo, ou oscila ao redor de zero? O Hamiltoniano tem simetria de translação, de maneira que o estado de equilíbrio deve ter magnetização espacialmente homogênea, a fim de refletir a simetria do Hamiltoniano. Essa condição sobre o estado de equilíbrio seria violada pela permanência de uma não homogeneidade descrita por um modo cujo valor médio não tendesse a zero.

A medida que o número de sítios N do sistema cresce, o tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial t_r^- também cresce (3.42). O aumento de t_r^- poderia permitir que o patamar de oscilação decrescesse até o valor nulo. Por outro lado, também aumentam os períodos associados às menores frequências $\Omega^-(Q_A)$, pois as diferenças de energia entre níveis próximos aos mínimos dos vales da curva de dispersão diminuem com aumento de N . Dessa maneira, o patamar de oscilação iria decrescer mais lentamente. Para que se atinja um estado de equilíbrio homogêneo, a medida que N cresce, t_r^- precisa crescer mais que os $1/\Omega^-(Q_A)$.

O comportamento do patamar de oscilação no limite de cadeias grandes em tempos longos foi analisado por meio de duas varreduras do patamar em relação ao número N de sítios da cadeia, Tabela 3.4. A varredura mais relevante consistiu na escolha do número de onda Q como sendo Q_A para cada N , $Q_A = Q_A(N)$. A segunda varredura consistiu na escolha de um mesmo Q para todos os N . Essa segunda escolha requer que os números de sítios das cadeias analisadas sejam escolhidos de maneira que cada

Tabela 3.3: $XY(h, \gamma)$: Mínimos Q_{mv} da curva de dispersão (3.17) e Criticalidades Q_A e Q_B . $N = 1200$. Os números de onda estão expressos em unidades de $\frac{2\pi}{1200}$. Q_A e $2\pi - Q_A$ correspondem à mesma criticalidade, assim como Q_B e $2\pi - Q_B$. Os Q_{mv} foram determinados através da Figura 3.22. $2Q_{\text{mv}}$ corresponde a $2\pi - Q_A$ e $2\pi - 2Q_{\text{mv}}$ a Q_A . Os números de onda críticos $Q_A = Q_A(h, \gamma)$ e $Q_B = Q_B(h, \gamma)$ foram determinados para cada par (h, γ) comparando-se modos $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ de amostragens definidas por muitos números de onda Q . Os valores críticos Q_A e Q_B são definidos por modos $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ que no momento da primeira reconstrução parcial da magnetização apresentam respectivamente o maior patamar de oscilação e a maior amplitude de oscilação. Trata-se de um critério ‘visual’. Os retângulos indicam as criticalidades analisadas através de ajustes definidos por lei de potência, seção 3.4.2. Para $\gamma = 0$ e $h < 1$ os fundos dos vales transformam-se em ‘bicos’, de maneira que não surge *nesting* nem criticalidade do tipo (A).

	$h = 0.2$			$h = 0.5$			$h = 0.8$			$h = 1.0$		
γ	Q_{mv}	Q_A	Q_B	Q_{mv}	Q_A	Q_B	Q_{mv}	Q_A	Q_B	Q_{mv}	Q_A	Q_B
0.0	338	—	93	400	—	223	477	—	379	—	—	?
0.2	340	519	243	405	390	348	488	222	475	—	—	569
0.5	352	496	330	439	319	440	—	—	565	—	—	497
0.8	412	372	407	—	—	550	—	—	488	—	—	315

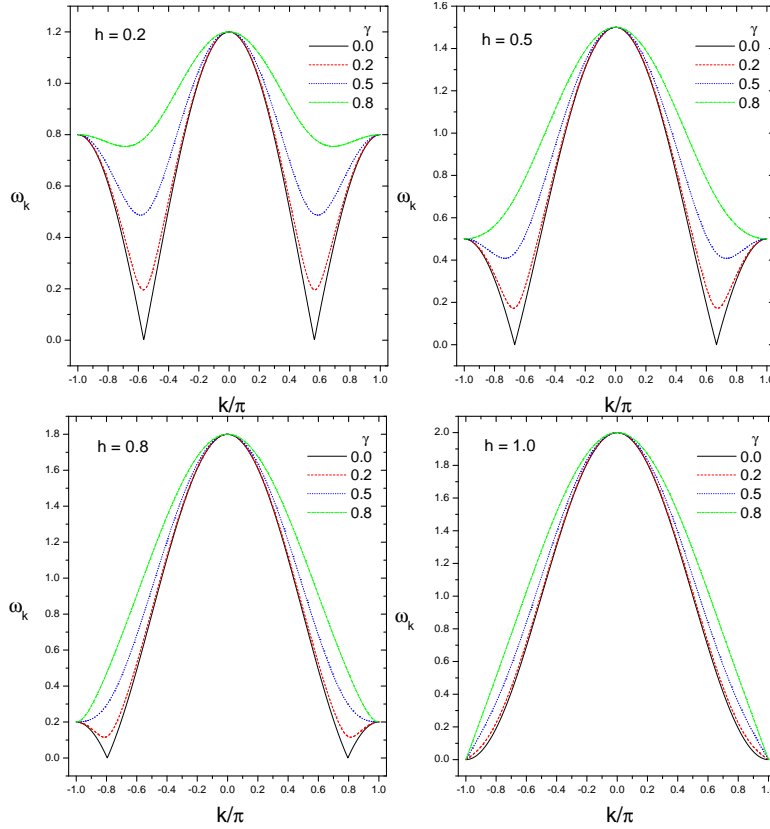


Figura 3.22: Curva de Dispersão ω_k vs k , (3.17). $h = 0.2, 0.5, 0.8, 1.0$, $\gamma = 0, 0.2, 0.5, 0.8$. Esta figura apresenta analogias com a Figura 4.14.

número seja múltiplo dos menores. Dessa maneira qualquer Q de uma cadeia menor estará contido nas cadeias maiores.

Como mencionado na seção 3.3.1, Figura 3.6, as evoluções de um modo $\langle S_Q^z \rangle_t$, ou $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ ou $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$, definido por um certo Q , para sistemas com números de sítios N diferentes, coincidem até a primeira reconstrução parcial do sistema com menor número de sítios. De fato coincidências foram verificadas para os Q_{49} e Q_{50} indicados na Tabela 3.4. Para os $Q_A(N)$ é evidente que não se pode esperar aquele tipo de coincidência.

O patamar de oscilação P_r atribuído a cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ foi registrado logo antes de manifestar-se a primeira reconstrução parcial da magnetização em $t_r^-(N)$. As relações entre os patamares e o inverso do número de sítios, N^{-1} , estão mostradas na Figura 3.24. Como é intuitivo de se esperar, P_r é mais alto quando a varredura é feita com os $Q_A(N)$, ao invés de ser feita com Q fixo, por exemplo Q_{49} ou Q_{50} . A condição $P_r \rightarrow 0$, quando $N \rightarrow \infty$, é compatível com os dados obtidos para $P_r(Q_A)$ vs N^{-1} , pois a lei de potência,

$$P_r = a_0 (N^{-1})^{a_1}, \quad a_1 > 0, \quad (3.45)$$

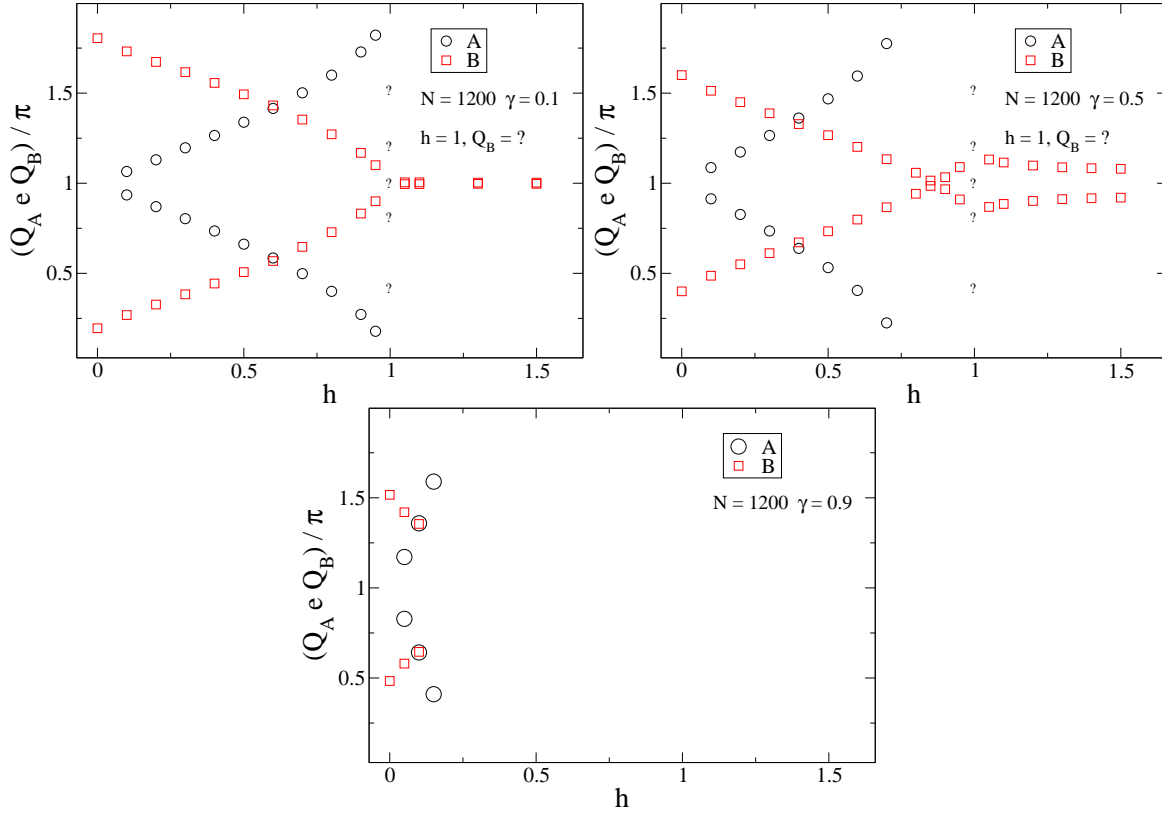


Figura 3.23: Q_A vs h e Q_B vs h . $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. (a) $\gamma = 0.1$, (b) $\gamma = 0.5$, (c) $\gamma = 0.9$. Nesta figura, Q_A e Q_B correspondem aos modos que mais se assemelham aos modos críticos do sistema infinito. Para $h = 1$, e $\gamma = 0.1$ ou 0.5 , o comportamento das funções $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ é irregular quando se varia o número de onda Q , de maneira que a criticalidade Q_B não fica definida. Para $\gamma = 0.9$ e $h > h_{LA} > 0.15$ não há criticalidade do tipo (A). Para $\gamma = 0.9$ e $h > h_{LB} > 0.1$ a criticalidade do tipo (B) para cada valor de h , ou inexiste, ou se existe não está bem definida. As curvas associadas a Q_A apresentam analogia com as curvas de $Q_{(2c)}$ vs $1/J^{(2)}$ da Figura 4.15.

ajusta-se muito bem aos dados da Tabela 3.4, Figura 3.24. Esse ajuste, no entanto, não constitui uma extrapolação dos pontos da curva que resulte no ponto de interesse, $P_r \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$. Ao contrário, esse ponto já está incluído na lei de potência (3.45) para quaisquer valores de seus parâmetros. Os parâmetros do ajuste são

$$a_0 = 12.9, \quad a_1 = 0.318 \simeq \frac{1}{3}. \quad (3.46)$$

O fato de o patamar de oscilação em todas as varreduras feitas tender a zero a medida que o número de sítios da cadeia cresce, condiz com a definição de estado de equilíbrio caracterizado por magnetização homogênea, quando o Hamiltoniano tem simetria de translação (3.10).

Tabela 3.4: Patamar de oscilação de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ logo antes da primeira reconstrução parcial da magnetização. P_r vs $1/N$. XY(h, γ), $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$.

$Q_{49} = 2\pi \frac{49}{120}$ e $Q_{50} = 2\pi \frac{50}{120}$. t_r^- é o instante correspondente à primeira reconstrução parcial. P_r é o patamar de oscilação logo antes de manifestar-se a primeira reconstrução parcial. Nesta Tabela Q_{50} , Q_A e Q_{49} estão expressos em unidades de $\frac{2\pi}{N}$. Esta Tabela também mostra que o t_r^- escala-se linearmente com N como prescrito por (3.42). Ver P_r vs $1/N$ na Figura 3.24.

N	Q_{50}	t_r^-	P_r	Q_A	t_r^-	P_r	Q_{49}	t_r^-	P_r
12000	5000	10525	.0	4966	10460	.0231	4900	10346	.0
6000	2500	5274	.0	2482	5238	.0290	2450	5184	.0
1200	500	1066	.0024	495	1054	.0463	490	1046	.0
600	250	539	.0107	247	530	.0591	245	524	.0
240	100	220	.0327	99	217	.0733	98	214	.0696
120	50	111	.0565	49	108	.0996	49	108	.0996

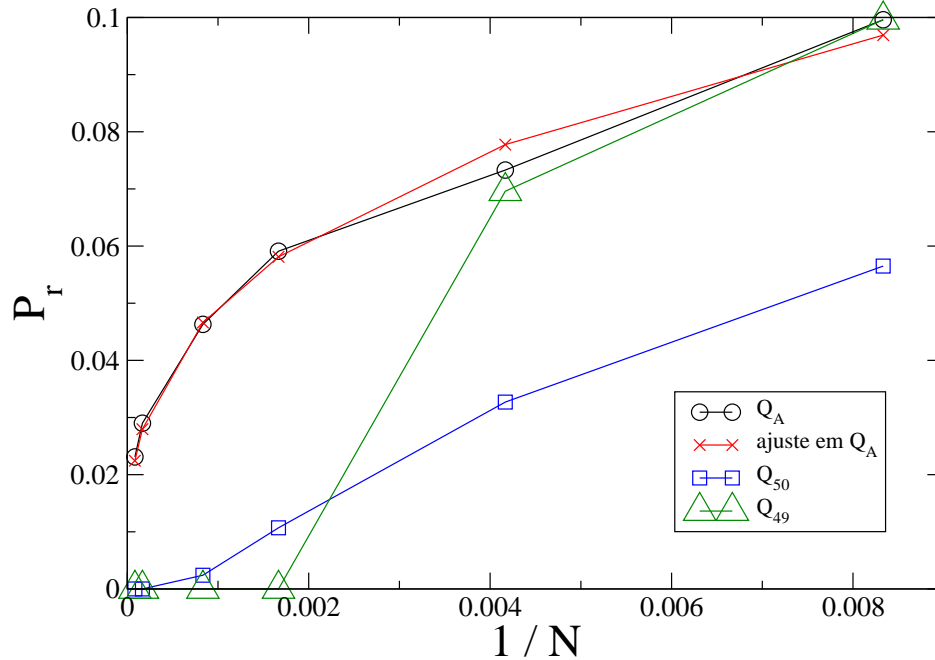


Figura 3.24: Patamar de oscilação de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ logo antes de manifestar-se a primeira reconstrução parcial da magnetização P_r vs $1/N$. $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. Obtido da Tabela 3.4. Esta Figura apresenta analogias com a Figura 4.19.

Criticalidade do tipo (B)

Não se determinou uma relação entre a criticalidade do tipo (B), Figura 3.20 para $Q = \frac{330}{600}\pi$, e a curva de dispersão, por exemplo, através de um *nesting*. Uma forma de se procurar a evidência de *nesting* consiste na identificação dos pontos onde a derivada segunda da dispersão se anula, e em se verificar se os valores da derivada primeira nesses pontos coincidem. Porém os valores da derivada primeira são distintos nos pontos onde a derivada segunda se anula.

As curvas de dispersão, Figuras 3.21 e 3.22, e a Tabela 3.3 mostram que não existe uma ligação sistemática entre a criticalidade do tipo (B) e a presença dos vales da curva de dispersão. Por exemplo, para $(h = 0.2, \gamma = 0.2)$, $(h = 0.5, \gamma = 0.2)$ e $(h = 0.2, \gamma = 0.5)$ não há uma ligação aparente entre Q_B e Q_{mv} . Além disso, há valores de h e γ associados à criticalidade do tipo (B) e a curvas de dispersão sem vales. Por outro lado, nos casos $(h = 0.2, \gamma = 0.8)$ e $(h = 0.5, \gamma = 0.5)$, há proximidade entre os valores $Q_B \simeq Q_{mv}$, a qual poderia sugerir uma associação entre a criticalidade do tipo (B) e a ocorrência de *nesting* entre o máximo situado em $k = 0$ e cada um dos dois mínimos da curva de dispersão. Acredita-se que tal proximidade seja apenas uma coincidência. Os valores de Q_B e Q_{mv} também não se ajustam à possibilidade de haver *nesting* entre o máximo em $k = \pi$ e cada um dos dois mínimos da curva de dispersão.

A criticalidade do tipo (B) não está ligada ao *gap*, porque também surge no caso sem *gap*, com $\gamma = 0$.

3.4.2 Criticalidades: ajustes com lei de potência

Nesta seção toda análise será feita para os valores dos parâmetros $h = 0.2$ e $\gamma = 0.5$, e quase exclusivamente para cadeia com 1200 sítios.

Tempos de Reconstrução

Assim como na dinâmica gerada pelo Hamiltoniano $XY(\gamma)$, os tempos de reconstrução $t_r^\pm(N)$ de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ também dependem dos parâmetros do Hamiltoniano e do número de onda, e aumentam linearmente com o número de sítios N da cadeia, (3.42). A Figura 3.25 apresenta analogias com a Figura 3.7. Há uma descontinuidade apreciável no comportamento do tempo de reconstrução de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ nas vizinhanças da criticalidade γ_B , Figura 3.25 (a).

$\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ apresentam formas diferentes de reconstrução parcial, as quais são análogas ao caso com $h = 0$, Figura 3.4 e página 45. No caso do Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$ a distinção entre os dois tipos de reconstrução parcial pode ser vista nas Figuras 3.19 e 3.20. Na reconstrução parcial de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ o valor médio oscila acima de zero e em seguida volta a oscilar em torno de zero, enquanto que no caso de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ o valor médio continua oscilando em torno de zero, porém com amplitude maior.

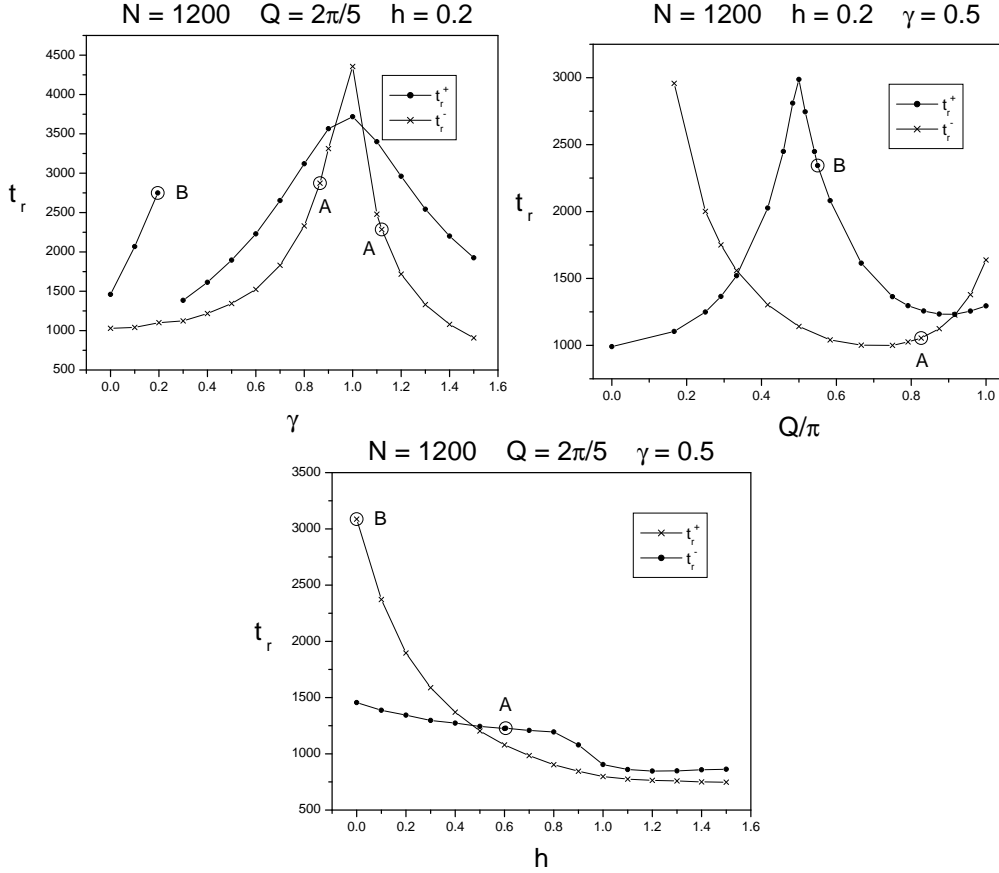


Figura 3.25: Tempos transcorridos até a primeira reconstrução parcial de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ (3.37) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38). (a) t_r^\pm vs γ para $h = 0.2$ e $Q = \frac{2\pi}{5}$, (b) t_r^\pm vs Q para $h = 0.2$ e $\gamma = 0.5$, (c) t_r^\pm vs h para $\gamma = 0.5$ e $Q = \frac{2\pi}{5}$. $N = 1200$. Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. Os círculos nesta figura indicam os t_r^\pm correspondentes aos parâmetros associados à marca da criticalidade do sistema infinito presente neste sistema finito: $\gamma_B = 0.195$, $\gamma_A = 0.865$ e $\gamma_A = 1.12$; $Q_B = \frac{330}{600}\pi$ e $Q_A = \frac{496}{600}\pi$; $h_B = 0$ e $h_A = 0.605$. A determinação dos parâmetros ‘críticos’ γ_B , γ_A , h_B e h_A foi feita dentro da faixa de erro de 0.005. No terceiro gráfico, o fato de a criticalidade do tipo (B) estar associada ao valor nulo do campo h é apenas uma coincidência que resulta dos valores particulares de Q e γ . A Figura 3.23 mostra outros valores possíveis do campo h associados à criticalidade do tipo (B). A curva t_r^- vs Q assemelha-se à curva de t_r da Figura 4.16. As Figuras (a) e (b) apresentam analogias com as Figuras 3.7 (a) e (b).

Ajustes de ν^\pm e τ^\pm

Através do mesmo procedimento usado na seção 3.3.2 realizaram-se ajustes de ν^- e τ^- e ajustes de ν^+ e τ^+ para as envoltentes de $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$, respectivamente. As envoltentes foram selecionadas como ilustrado na Figura 3.11. Os ajustes foram feitos por meio da lei de potência (3.43), para amostragens das funções $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ para diferentes valores do número de onda Q , e para os valores fixos $h = 0.2$

e $\gamma = 0.5$. Os ajustes para ν^\pm e τ^\pm estão apresentados nas Figuras 3.26 e 3.27.

As marcas das criticalidades dos tipos (A) e (B) são manifestadas nos ajustes de ν^- e τ^- e nos ajustes de ν^+ e τ^+ , respectivamente. A partir dos ajustes feitos para a cadeia com 1200 sítios, os valores ajustados para os expoentes ν^\pm na criticalidade não indicam um valor nítido para o que seria o valor crítico correspondente à cadeia infinita. Através de ajustes para a cadeia com doze mil sítios e com a introdução de informações extra, há indicação de que os valores críticos de ν^\pm sejam $\frac{1}{3}$ para ambos tipos de criticalidade (A) e (B), Figura 3.26. As informações extra são os números de onda Q mais próximos do que seriam os valores críticos do sistema infinito, obtidos por meio de inspeção das curvas Ω^\pm vs k . Para os demais valores de Q os ajustes para os expoentes ν^\pm aproximam-se de $\frac{1}{2}$. Os números de onda Q_A e Q_B associados às criticalidades são muito próximos dos correspondentes valores obtidos por inspeção das funções $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$, mostrados na Tabela 3.4.

À direita de Q_B e à esquerda de Q_A , $1/\tau^+$ e $1/\tau^-$ respectivamente tendem a zero, Figura 3.27. Nas vizinhanças à direita de Q_B e à esquerda de Q_A , $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ respectivamente apresentam batimentos cujos períodos de oscilação são comparáveis aos tempos de reconstrução, prevenindo ajustes de ν^\pm e τ^\pm , por exemplo, $Q = \frac{336}{600}\pi$, Figura 3.20, e $Q = \frac{486}{600}\pi$, Figura 3.19. O fato de os $1/\tau^\pm$ tenderem a zero quando Q aproxima-se do valor crítico pelo mesmo lado em que aparecem os batimentos é análogo ao que se passa na dinâmica gerada pelo $XY(\gamma)$ no sistema finito, Figura 3.15. E também é compatível com a divergência característica da criticalidade encontrada no sistema infinito (3.34). Atribui-se os batimentos à presença de PE próximos, os quais tornam-se degenerados no ponto crítico (Q_A, h_A, γ_A) ou (Q_A, h_B, γ_B). Possivelmente há *dois* PE na vizinhança do Q crítico onde há batimentos, e apenas *um* PE na vizinhança onde não há batimentos.

Não se calcularam as expressões associadas aos $1/\tau^\pm$ nos PE, referentes ao sistema infinito, como foi feito no caso da dinâmica gerada pelo $XY(\gamma)$, (3.33). Apesar de as expressões analíticas para as derivadas segundas de Ω^\pm serem conhecidas, não se conhecem expressões analíticas para os PE, as quais seriam o análogo de (3.29). Uma tarefa a ser feita consistiria na obtenção desses PE numericamente.

Há domínios de Q à esquerda de Q_B e à direita de Q_A , onde $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ respectivamente relaxam muito rapidamente. Nesses domínios as envolventes dessas funções não apresentam a forma de lei de potência, nem de lei exponencial. Tais envolventes apresentam dois regimes, o inicial de queda rápida, e o final, onde não resta muito para se relaxar, por exemplo, $Q = \frac{318}{600}\pi$, Figura 3.20, e $Q = \frac{505}{600}\pi$, Figura 3.19. Tal relaxação rápida não ocorre na dinâmica gerada pelo Hamiltoniano $XY(\gamma)$.

Pontos Estacionários Degenerados

As funções Ω^- e Ω^+ apresentam pontos estacionários degenerados, PED, na variável k quando o número de onda Q atinge algum valor crítico. As Figuras 3.28 e 3.29 mostram que as funções Ω^- e Ω^+ exibem, para os correspondentes valores críticos de Q , um ‘patamar’ muito aproximadamente constante

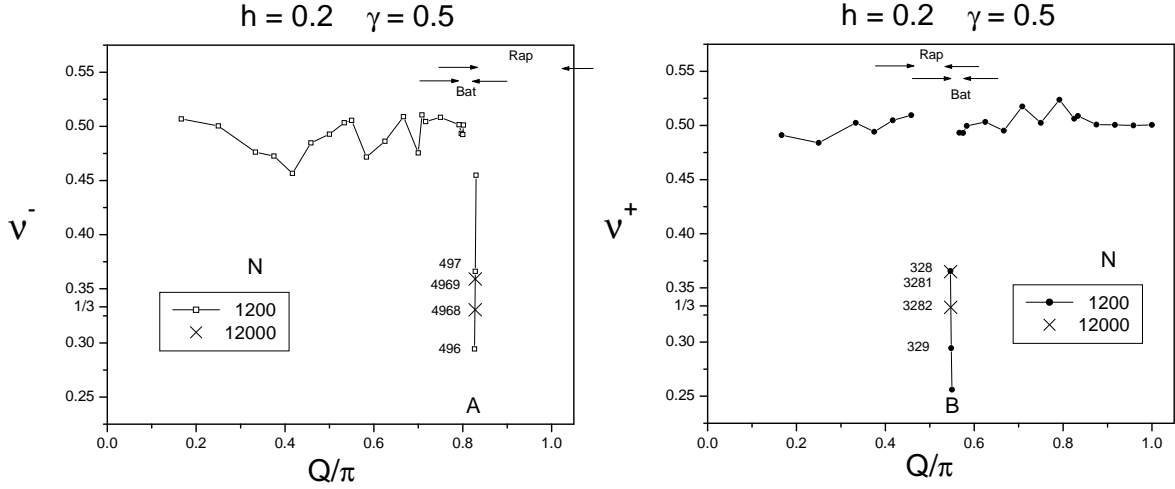


Figura 3.26: Ajustes de ν^- e ν^+ em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ (3.37). $N = 1200$ e 12000 . Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. (a) ν^- vs Q . (b) ν^+ vs Q .

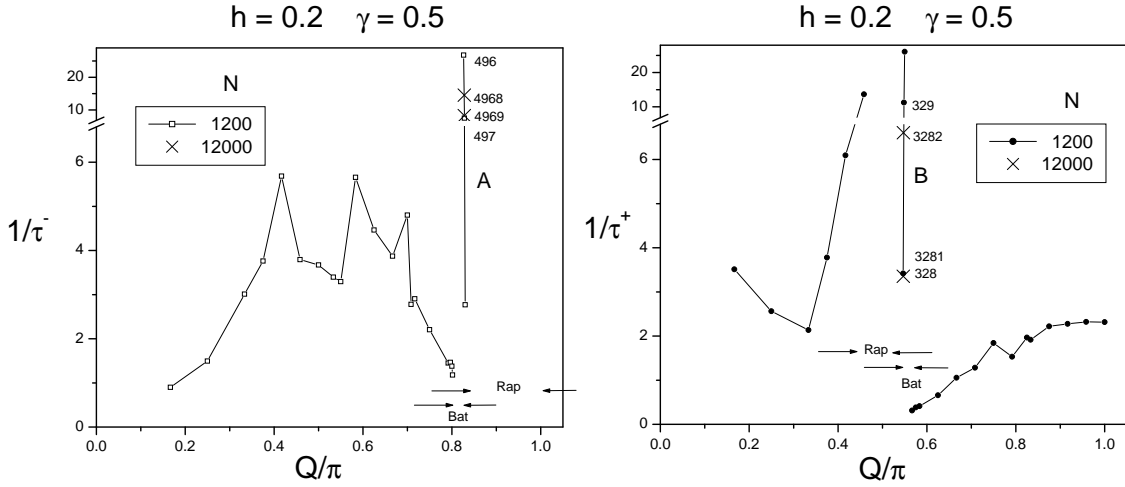


Figura 3.27: Ajustes de τ^- e τ^+ em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ (3.37). $N = 1200$ e 12000 . Estado inicial, $\rho_0(S^z)$. $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. (a) $\frac{1}{\tau^-}$ vs Q . (b) $\frac{1}{\tau^+}$ vs Q .

no domínio de k nas vizinhanças dos PED. Esses patamares podem ser observados na Figura 3.28, para Q_A nos PED $k = \pm\pi$, e na Figura 3.29, para Q_B nos PED $k = \sim \pm 0.4\pi$ e para $Q = 0.7\pi$ no PED $k = 0$.

As degenerescências dos PE das funções Ω^- e Ω^+ são caracterizadas por derivadas superiores nulas de cada uma dessas funções em relação a k , nos Q críticos, Figura 3.30. Verificou-se nessa Figura que nos PED, a primeira e a segunda derivada de Ω^\pm são nulas e a terceira é não nula, o que indica degenerescência dupla dos PE $k_e^{(2)}(Q_A)$ e $k_e^{(2)}(Q_B)$ de Ω^- e Ω^+ , respectivamente.

$$Q = Q_A(h, \gamma), \quad \left. \frac{\partial \Omega^-}{\partial k} \right|_{k=k_e^{(2)}(Q_A)} = \left. \frac{\partial^2 \Omega^-}{\partial k^2} \right|_{k=k_e^{(2)}(Q_A)} = 0, \quad \left. \frac{\partial^3 \Omega^-}{\partial k^3} \right|_{k=k_e^{(2)}(Q_A)} \neq 0, \quad (3.47)$$

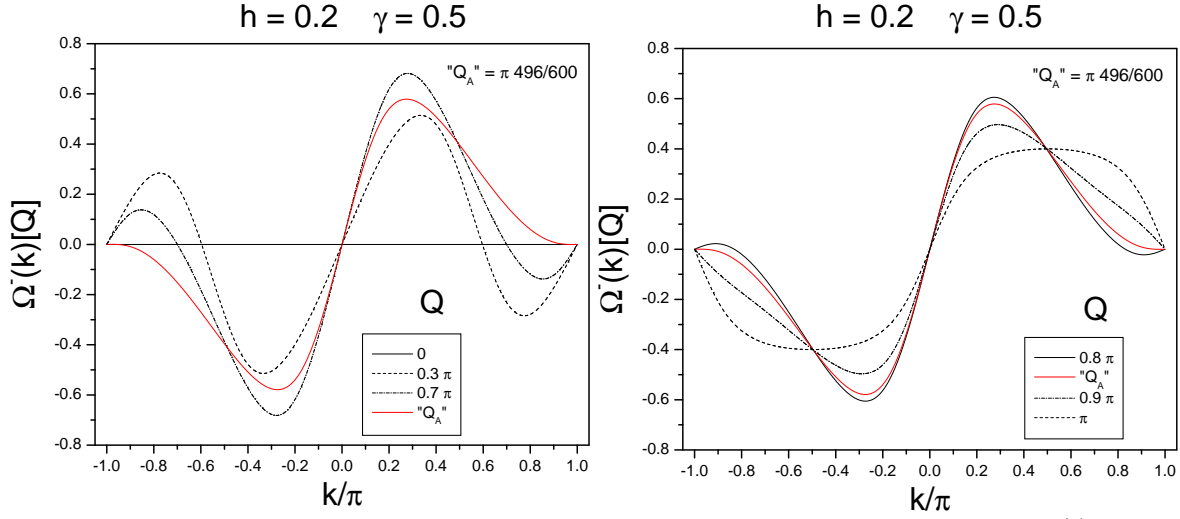


Figura 3.28: Ω^- vs k . $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$, $Q = 0, 0.3\pi, 0.7\pi, "Q_A" = \frac{496}{600}\pi, 0.8\pi, \pi$. Os PED $k_e^{(2)}(Q_A)$ são $\pm\pi$.

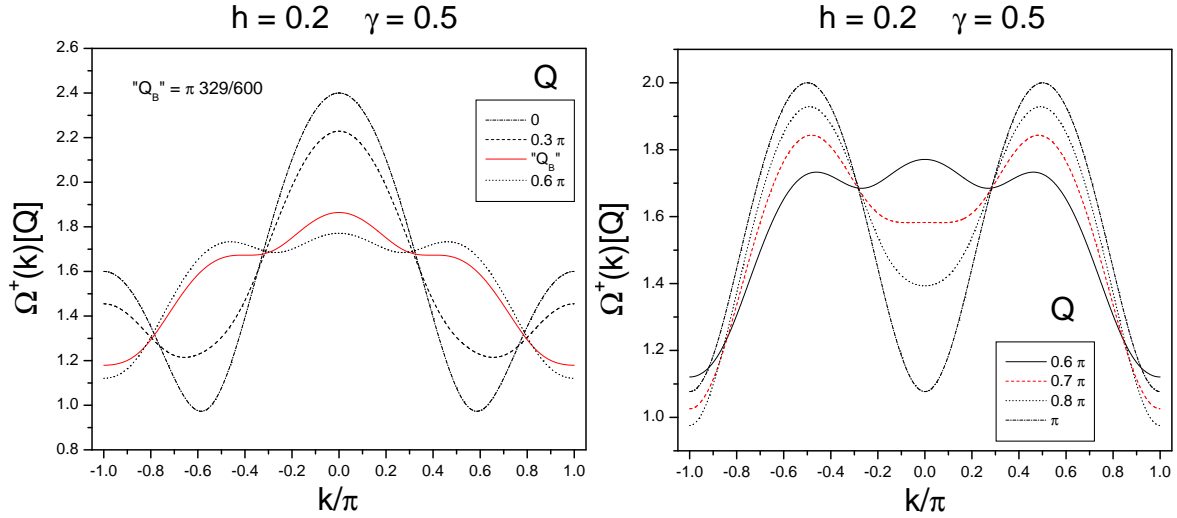


Figura 3.29: Ω^+ vs k . $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$, $Q = 0, 0.3\pi, "Q_B" = \frac{329}{600}\pi, 0.6\pi, 0.7\pi, 0.8\pi, \pi$. Os PED $k_e^{(2)}(Q_B)$ são $\sim \pm 0.4\pi$.

$$Q = Q_B(h, \gamma), \quad \left. \frac{\partial \Omega^+}{\partial k} \right|_{k=k_e^{(2)}(Q_B)} = \left. \frac{\partial^2 \Omega^+}{\partial k^2} \right|_{k=k_e^{(2)}(Q_B)} = 0, \quad \left. \frac{\partial^3 \Omega^+}{\partial k^3} \right|_{k=k_e^{(2)}(Q_B)} \neq 0. \quad (3.48)$$

A Figura 3.30, correspondente aos parâmetros $h = 0.2$ e $\gamma = 0.5$ assim como as duas Figuras anteriores, também indica que os PED $k_e^{(2)}(Q_A)$ são $\pm\pi$, e os $k_e^{(2)}(Q_B)$ são $\approx \pm 0.40\pi$. As derivadas primeira e segunda de $\Omega^+(Q = 0.7\pi)$ também anulam-se nos PED, mas não foram exibidas porque esse número de onda $Q = 0.7\pi$ não está associado a uma criticalidade que possa ser nitidamente percebida em $\langle S_{\tilde{Q}}^z \rangle_t^{(+)}$.

Para as dinâmicas analisadas no limite assintótico de sistemas infinitos através do método da Fase

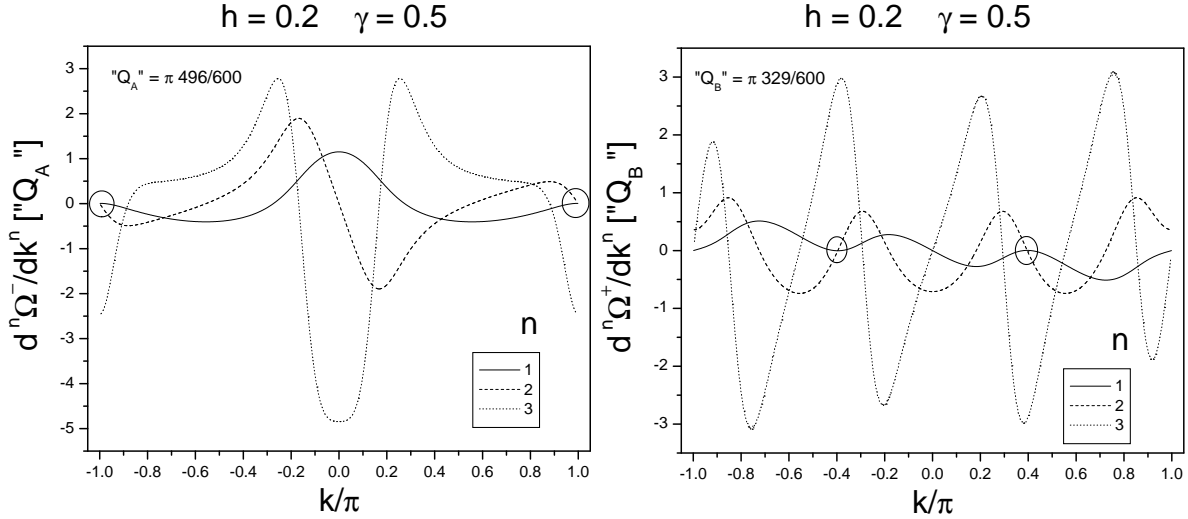


Figura 3.30: $\frac{\partial^n \Omega^-}{\partial k^n}$ vs k , $Q = Q_A$. $\frac{\partial^n \Omega^+}{\partial k^n}$ vs k , $Q = Q_B$. $n = 1, 2, 3$. $h = 0.2$, $\gamma = 0.5$. Os círculos indicam os PED $k_e^{(2)}(Q_A)$ e $k_e^{(2)}(Q_B)$. Essa Figura sugere que os PE de Ω^+ dependem dos parâmetros h e γ , enquanto que os PE de Ω^- são sempre $\pm\pi$. As expressões analíticas das derivadas de Ω^\pm não estão em [4]. Comunicação pessoal.

Estacionária [4], foi enunciado que os expoentes ν^\pm da lei de potência são dados por frações da forma p/q . Os valores dos quocientes q são iguais às ordens das derivadas de mais baixa ordem não nulas de Ω^- ou Ω^+ . As ordens das derivadas não nulas são iguais a *três* nos pontos críticos Q_A e Q_B , e *dois* fora das criticalidades. Os numeradores são iguais a *um* em muitos casos tratados em [4] e esse valor será tomado como hipótese a ser verificada. Espera-se então que ambos expoentes ν^\pm associados aos modos $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ apresentem salto $\frac{1}{2}$ para $\frac{1}{3}$ na criticalidade. Esse salto é análogo ao da Figura 3.2.

Os valores ajustados para ν^\pm para a cadeia com doze mil sítios são próximos de $\frac{1}{3}$, quando Q é escolhido próximo ao Q crítico do sistema infinito, Figura 3.26, como foi exposto na subseção anterior. Para os demais Q os valores ajustados para ν^\pm ficam próximos de $\frac{1}{2}$. Para a cadeia com doze mil sítios, Q_A e Q_B foram determinados inspecionando-se respectivamente as curvas Ω^- vs k e Ω^+ vs k para diversos números de onda Q contidos no sistema com doze mil sítios, e selecionado-se em cada caso o Q associado à curva cuja região ‘constante’ no domínio de k fosse a mais larga. Essas curvas são análogas àsquelas mostradas nas Figuras 3.28 e 3.29.

No caso do Hamiltoniano XY(γ) a degenerescência dos PE, no ponto crítico (γ_c, Q_c) , é tripla, (3.32), Figura 3.10. O expoente ν associado à relaxação crítica é $\frac{1}{4}$.

Capítulo 4

Magnetização e Troca de Heisenberg

Neste Capítulo será dada continuidade ao tratamento do problema da relaxação do spin em cadeias unidimensionais. O Hamiltoniano de troca de maior interesse é o Heisenberg com anisotropia axial, XXZ. Assim como no Capítulo anterior a relaxação é analisada através de valores médios de componentes de Fourier da magnetização, como foi definido na seção 3.1. Os *ensembles* de estados iniciais para os quais se calculam os valores médios apresentam magnetização espacialmente não homogênea, e neste Capítulo são estados puros. Desenvolveu-se o cálculo numérico e exato dos modos não homogêneos da magnetização referentes às três componentes do spin S_Q^α , com a dinâmica gerada pelo Hamiltoniano XYZ, o qual apresenta anisotropia em todas as componentes da interação de troca. Compararam-se as dinâmicas de sistemas finitos dadas pelas soluções analíticas do Hamiltoniano XY(γ) com as correspondentes soluções numéricas nos limites planares do Hamiltoniano XYZ. Obteve-se maior quantidade de informação para os modos longitudinais $\langle S_Q^z \rangle_t$, sendo a dinâmica gerada pelo Hamiltoniano XXZ. Esses modos foram calculados nos subespaços de uma onda de spin, de duas ondas de spin e no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z . Nesse último subespaço foram exploradas simetrias espaciais, e no subespaço de uma onda foram introduzidas impurezas e interações entre segundos vizinhos.

4.1 Cálculo Numérico — XYZ S_Q^α

Nesta seção será apresentado o cálculo da evolução temporal das médias das componentes $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$, $\alpha = x, y, z$, através de diagonalização numérica do Hamiltoniano XYZ. A base de estados utilizada é definida por produtos diretos de auto-estados dos operadores de spin em cada sítio da cadeia, S_j^z . Os resultados desta seção constituem testes de validação do cálculo numérico da componente longitudinal $\langle S_Q^z \rangle_t$ com o resultado analítico (3.20), para certos estados iniciais, além de testes de consistência do cálculo numérico das três componentes $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$, seção 4.2.

A média da magnetização é definida pela expressão (3.6). O estado inicial é um estado puro, e será descrito na base de produtos diretos pela superposição,

$$|\psi_0\rangle = \sum_l c_l |M_l\rangle, \quad (4.1)$$

onde $|M_l\rangle$ designa um produto direto, (A.3). No algoritmo desenvolvido, os coeficientes c_l podem ser escolhidos como sendo reais ou complexos. Há infinitas escolhas distintas para os coeficientes que definem um estado inicial arbitrário, apesar de o espaço de estados do problema ser finito. Mesmo escolhendo-se como estado inicial um único entre os estados do tipo produto direto da base, há muitas possibilidades.

A evolução temporal de um modo não homogêneo da magnetização é mais simplesmente expressa em uma base de auto-estados do Hamiltoniano, do que em outros tipos de bases. Por outro lado, o cálculo será feito na base dos estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$. Os auto-estados $|\zeta\rangle$, (2.32), do Hamiltoniano (2.1) foram determinados na base dos estados $|M_l\rangle$. Cada uma das bases é construída a fim de gerar o espaço de estados completo do Hamiltoniano, ou apenas uma fração do espaço de estados, dependendo da simetria do estado inicial, da simetria do Hamiltoniano¹ e de qual componente da magnetização será calculada, $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$, $\alpha = x, y, z$. Serão apresentadas regras de seleção para os $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$ na seção 4.1.1 e para $\langle S_Q^z \rangle_t$ na seção 4.3.2.

O valor médio a ser calculado depende de ambos, os autovalores e os auto-estados do Hamiltoniano. A expressão de $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$ (3.6) é escrita como,

$$\langle S_Q^\alpha \rangle_t = \sum_{\zeta\zeta'} A_{\zeta\zeta'}^{(\alpha, Q, \psi_0)} e^{i\omega_{\zeta\zeta'} t}, \quad (4.2)$$

$$A_{\zeta\zeta'}^{(\alpha, Q, \psi_0)} = \langle \psi_0 | \zeta \rangle \langle \zeta | S_Q^\alpha | \zeta' \rangle \langle \zeta' | \psi_0 \rangle, \quad \omega_{\zeta\zeta'} = E_\zeta - E_{\zeta'}. \quad (4.3)$$

A expressão de $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$ (4.2) foi convertida para uma forma com apenas um índice de soma,

$$\langle S_Q^\alpha \rangle_t = \sum_l B_l^{(\alpha, Q, \psi_0)} \exp\left(i\omega_l^{(\alpha, Q, \psi_0)} t\right), \quad (4.4)$$

$$B_l^{(\alpha, Q, \psi_0)} = \sum_{\zeta\zeta'}^{(\omega_l = \omega_{\zeta\zeta'})} A_{\zeta\zeta'}^{(\alpha, Q, \psi_0)}. \quad (4.5)$$

Cada amplitude (4.5) é incluída na expressão (4.4) se for não nula, $B_l^{(\alpha, Q, \psi_0)} \neq 0$. Apesar de as frequências $\omega_{\zeta\zeta'}$ (4.3) não dependerem de α , Q e $|\psi_0\rangle$, as frequências $\omega_l^{(\alpha, Q, \psi_0)}$ dependem, porque são especificadas pelas amplitudes não nulas $B_l^{(\alpha, Q, \psi_0)}$. A dependência das frequências $\omega_l^{(\alpha, Q, \psi_0)}$ com os parâmetros do Hamiltoniano não está indicada na notação, porém fica implícita. Cada parcela em (4.4)

¹O conhecimento da simetria de um estado qualquer consiste em se saber como tal estado transforma-se frente às operações do grupo de simetria do Hamiltoniano. A simetria do Hamiltoniano de troca de spin (2.1) depende das relações entre os parâmetros de anisotropia ξ_x, ξ_y, ξ_z .

está associada a uma frequência distinta das demais frequências, $\omega_l^{(\alpha, Q, \psi_0)} \neq \omega_{l'}^{(\alpha, Q, \psi_0)}$, se $l \neq l'$. As expressões apresentadas nesta seção foram obtidas tomando-se $J^{(1)} = 1$, para o Hamiltoniano (2.1), e $\hbar = 1$. O tempo t está em unidades arbitrárias.

4.1.1 Desacoplamento de Subespaços

Modos longitudinais

Os estados do tipo produto direto de auto-estados dos operadores S_j^z , $|M_l\rangle$, também são auto-estados dos operadores S_Q^z . Existem auto-estados simultâneos dos S_j^z e dos S_Q^z porque esses operadores comutam entre si, (3.1). De maneira que S_Q^z não acopla estados $|M_l\rangle$ com autovalores de S^z diferentes.

Dessa característica e do fato de os auto-estados do Hamiltoniano XXZ (2.32) serem auto-estados de S^z , decorre que no caso da interação XXZ cada operador S_Q^z tem elementos de matriz nulos entre auto-estados do Hamiltoniano com autovalores de S^z distintos,

$$\begin{aligned} \langle \zeta | S_Q^z | \zeta' \rangle &= 0, \quad \text{se } m \neq m', \\ \text{onde } S^z | \zeta \rangle &= m | \zeta \rangle \text{ e } S^z | \zeta' \rangle = m' | \zeta' \rangle. \end{aligned} \quad (4.6)$$

A partir de (4.3) verifica-se que a evolução de cada modo longitudinal $\langle S_Q^z \rangle_t$ fica desacoplada nos subespaços definidos por autovalores diferentes de S^z : se o estado inicial for uma superposição de estados cujos autovalores de S^z sejam diferentes, então o valor médio $\langle S_Q^z \rangle_t$ é a soma de parcelas independentes correspondentes a estados iniciais formados pelas componentes do estado dado em cada subespaço de S^z ,

$$\begin{aligned} \text{se } |\psi_0\rangle &= \sum_{\lambda=1}^{\kappa} |\phi_\lambda\rangle, \quad \text{onde } S^z |\phi_\lambda\rangle = m^\lambda |\phi_\lambda\rangle, \text{ e } m^\lambda \neq m^{\lambda'}, \text{ se } \lambda \neq \lambda', \\ \text{então } \langle S_Q^z \rangle_{\psi_0, t}^{XXZ} &= \sum_{\lambda=1}^{\kappa} \langle S_Q^z \rangle_{\phi_\lambda, t}^{XXZ}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Essa dinâmica é equivalente à dinâmica a partir do estado de mistura, $\rho_0 = \sum_\lambda |\phi_\lambda\rangle \langle \phi_\lambda|$.

Quando o Hamiltoniano é o XYZ (2.1), a evolução de $\langle S_Q^z \rangle_t$ desacopla-se de maneira análoga a de (4.7), apenas entre os dois subespaços definidos pelos autovalores de S^z par e ímpar,

$$\begin{aligned} \text{se } |\psi_0\rangle &= |\phi_+\rangle + |\phi_-\rangle, \quad \text{onde } \mathcal{L} |\phi_\pm\rangle = \pm |\phi_\pm\rangle, \\ \text{então } \langle S_Q^z \rangle_{\psi_0, t}^{XYZ} &= \langle S_Q^z \rangle_{\phi_+, t}^{XYZ} + \langle S_Q^z \rangle_{\phi_-, t}^{XYZ}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde \mathcal{L} é dado por (2.10).

Explorando simetrias espaciais é possível preparar estados iniciais para os quais haja outros desacoplamentos, seção 4.3.2.

Modos transversais

Os operadores S_Q^x e S_Q^y acoplam estados cujos autovalores de S^z diferem por uma unidade. Para que as evoluções temporais dos modos $\langle S_Q^x \rangle_t$ e $\langle S_Q^y \rangle_t$ geradas pelo Hamiltoniano XXZ não sejam nulas (4.3), o estado inicial precisa ser uma superposição de pelo menos dois estados cujos autovalores de S^z também difiram por uma unidade. Serão acoplados aqueles subespaços de S^z para os quais o estado inicial tenha componentes diferindo de uma unidade. Se o estado inicial tiver componentes em todos os subespaços, as evoluções temporais dos modos $\langle S_Q^x \rangle_t$ e $\langle S_Q^y \rangle_t$ acoplam o espectro completo de 2^N estados. Para que as evoluções temporais dos modos $\langle S_Q^x \rangle_t$ e $\langle S_Q^y \rangle_t$ geradas pelo Hamiltoniano XYZ não sejam nulas (4.3), o estado inicial precisa ser uma superposição de pelo menos dois estados cujos autovalores de S^z sejam um par e o outro ímpar. Tal evolução temporal irá acoplar o espectro completo de 2^N estados.

4.1.2 O sinal da Constante de Troca

A interação de troca entre primeiros vizinhos foi escolhida quase sempre como sendo antiferromagnética: $J^{(1)} = 1$ e os parâmetros ξ_x , ξ_y e ξ_z positivos, (2.1). Alguns cálculos foram feitos com acoplamento ferromagnético, $J^{(1)} = -1$ e os parâmetros ξ_x , ξ_y e ξ_z positivos, com a finalidade de comparação. A escolha do sinal da constante de troca desempenha um papel ‘secundário’ no cálculo da evolução temporal dos modos $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$. Se o estado inicial for uma superposição de estados do tipo produto direto dos auto-estados dos S_j^z , definida por coeficientes com a mesma fase complexa (4.9), então as evoluções das componentes longitudinal $\langle S_Q^z \rangle_t$ e transversal $\langle S_Q^x \rangle_t$ serão independentes do sinal da interação de troca $J^{(1)}$, enquanto que a evolução da componente transversal $\langle S_Q^y \rangle_t$ terá seu sinal alterado conforme o sinal de $J^{(1)}$. Essas considerações aplicam-se tanto para o Hamiltoniano XXZ como para o XYZ. Por outro lado, se o estado inicial envolver coeficientes complexos que não tenham a mesma fase complexa, a mudança do sinal da interação de troca altera a dinâmica. Essa alteração, no entanto, não muda qualitativamente a forma da função $\langle S_Q^z \rangle_t$.

Nesta seção será justificada a independência ou a mudança de sinal do valor médio da magnetização com o sinal da interação de troca $J^{(1)}$, o que decorre das expressões (4.2) e (4.3). Seja o estado inicial,

$$|\psi_0^\phi\rangle = e^{i\phi} \sum_l c_l^{\text{Re}} |M_l\rangle, \quad (4.9)$$

onde ϕ e os c_l^{Re} são reais. As amplitudes (4.3) estão vinculadas por,

$$A_{\zeta\zeta'}^{(\alpha, Q, \psi_0^\phi)} = g(\alpha) A_{\zeta'\zeta}^{(\alpha, Q, \psi_0^\phi)}, \quad g(\alpha) = \begin{cases} +1, & \alpha = x, z \\ -1, & \alpha = y \end{cases} \quad (4.10)$$

porque verifica-se para qualquer fase ϕ ,

$$\langle \psi_0^\phi | \zeta \rangle \langle \zeta' | \psi_0^\phi \rangle = \langle \psi_0^\phi | \zeta' \rangle \langle \zeta | \psi_0^\phi \rangle, \quad (4.11)$$

e porque,

$$\langle \zeta | S_Q^\alpha | \zeta' \rangle = g(\alpha) \langle \zeta' | S_Q^\alpha | \zeta \rangle. \quad (4.12)$$

Essa última expressão pode ser mostrada facilmente a partir da base de auto-estados do Hamiltoniano expressos exclusivamente com coeficientes reais (2.32), e das relações,

$$\begin{aligned} \langle M_l | S_Q^x | M_{l'} \rangle &= \langle M_{l'} | S_Q^x | M_l \rangle, \\ \langle M_l | S_Q^y | M_{l'} \rangle &= -\langle M_{l'} | S_Q^y | M_l \rangle, \\ \langle M_l | S_Q^z | M_{l'} \rangle &= 0, \end{aligned} \quad \text{se } l \neq l', \quad (4.13)$$

as quais decorrem das matrizes de Pauli. Os elementos de matriz dos operadores S_Q^α foram calculados na base de auto-estados dos S_j^z , assim como as matrizes de Pauli são escritas no mesmo tipo de base.

Partindo da relação entre as amplitudes (4.10), redefine-se o limite do índice ζ' na somatória (4.2),

$$\langle S_Q^\alpha \rangle_t = \sum_{\zeta, \zeta' < \zeta} A_{\zeta\zeta'}^{(\alpha, Q, \psi_0^\phi)} (e^{i\omega_{\zeta\zeta'} t} + g(\alpha) e^{i\omega_{\zeta'\zeta} t}) + \sum_{\zeta} A_{\zeta\zeta}^{(\alpha, Q, \psi_0^\phi)}, \quad (4.14)$$

e notando que $\omega_{\zeta\zeta'} = -\omega_{\zeta'\zeta}$ (4.3), reescreve-se (4.14),

$$\langle S_Q^\epsilon \rangle_t = \sum_{\zeta, \zeta' < \zeta} A_{\zeta\zeta'}^{(\epsilon, Q, \psi_0^\phi)} 2 \cos \omega_{\zeta\zeta'} t + \sum_{\zeta} A_{\zeta\zeta}^{(\epsilon, Q, \psi_0^\phi)}, \quad \epsilon = x, z, \quad (4.15)$$

$$\langle S_Q^y \rangle_t = \sum_{\zeta, \zeta' < \zeta} A_{\zeta\zeta'}^{(y, Q, \psi_0^\phi)} 2i \sin \omega_{\zeta\zeta'} t + \sum_{\zeta} A_{\zeta\zeta}^{(y, Q, \psi_0^\phi)}, \quad \sum_{\zeta} A_{\zeta\zeta}^{(y, Q, \psi_0^\phi)} = 0. \quad (4.16)$$

A mudança do sinal da interação de troca não altera as amplitudes $A_{\zeta\zeta'}^{(\alpha, Q, \psi_0^\phi)}$, $\alpha = x, y, z$, porque os auto-estados ficam invariantes se o Hamiltoniano for multiplicado por uma constante, porém altera os sinais das energias,

$$\begin{array}{ccccc} J^{(1)} & |\zeta\rangle & E_\zeta & \omega_{\zeta\zeta'} & \sin \omega_{\zeta\zeta'} & A_{\zeta\zeta'}^{(\alpha, Q, \psi_0^\phi)} & \left| \begin{array}{ccc} \langle S_Q^x \rangle_t & \langle S_Q^y \rangle_t & \langle S_Q^z \rangle_t \\ \langle S_Q^x \rangle_t & -\langle S_Q^y \rangle_t & \langle S_Q^z \rangle_t \end{array} \right. \end{array} \quad (4.17)$$

Fica evidente que, sob a mudança do sinal da interação de troca, a expressão (4.15) é invariante e a expressão (4.16) muda de sinal.

O termo independente do tempo da expressão (4.16) não viola a mudança do sinal porque é sempre nulo. As somatórias $\sum_{\zeta} A_{\zeta\zeta}^{(x, Q, \psi_0^\phi)}$ em (4.15) e $\sum_{\zeta} A_{\zeta\zeta}^{(y, Q, \psi_0^\phi)}$ em (4.16) são nulas porque envolvem os elementos diagonais de matriz dos operadores das componentes transversais S_Q^x e S_Q^y . Cada auto-estado $|\zeta\rangle$ do Hamiltoniano envolve auto-estados $|M_l\rangle$ de S^z de mesmo autovalor m , no caso do Hamiltoniano XXZ, ou de autovalores m pares os quais diferem entre si por múltiplos de dois, ou de autovalores m ímpares os quais também diferem entre si por múltiplos de dois, no caso do Hamiltoniano XYZ. Os operadores das componentes transversais somente têm elementos de matriz não nulos entre estados cujos autovalores de $|M_l\rangle$ difiram por uma unidade.

4.2 Validade do cálculo — $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$ XYZ

A validação do cálculo numérico da magnetização consistiu em três partes. Na primeira parte, foram feitas comparações entre os cálculos numérico e analítico dos modos longitudinais $\langle S_Q^z \rangle_t$, para o limite XY. Há concordâncias e discordâncias verificadas em sistemas com até 12 sítios. Na segunda parte, realizaram-se testes de consistência envolvendo os modos longitudinal e transversais para os Hamiltonianos planares XY, YZ e ZX, obtidos a partir do Hamiltoniano XYZ. Na terceira parte, comparou-se o cálculo numérico de $\langle S_Q^z \rangle_t$ para o modelo de Heisenberg isotrópico no sistema com quatro sítios (2.1) e (2.2) feito através do algoritmo implementado no computador e feito à mão.

4.2.1 $\langle S_Q^z \rangle_t$, XY — $\rho_0(S^z)$ vs $|M_l\rangle$

A evolução temporal de $\langle S_Q^z \rangle_t$ gerada pela versão fermiônica c-cíclica CC do Hamiltoniano XY, (3.14), a partir do estado inicial descrito pelo operador densidade dependente apenas da componente z do operador de spin $\rho_0(S^z)$ (3.12), calculada analiticamente (3.20), foi comparada com evoluções geradas pela versão de spin do Hamiltoniano XY, expressão (2.1) com $\xi_z = 0$, a partir de diversos estados puros $|\psi_0\rangle$ (4.1), calculadas numericamente (4.4). Nesta seção serão enfatizadas as comparações entre as evoluções a partir dos estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$ e do estado de mistura $\rho_0(S^z)$.

Há duas versões fermiônicas para o Hamiltoniano XY(h, γ) (3.14), uma com condições de contorno c-cíclicas CC , periódicas, e a outra com condições de contorno não c-cíclicas, NCC . Cada uma dessas versões fermiônicas está associada à descrição do Hamiltoniano de spin, com condições de contorno periódicas (3.13), em cada um dos dois subespaços do operador S^z : um desses subespaços é caracterizado pelos autovalores pares $0, \pm 2, \pm 4, \dots$ e o outro pelos ímpares $\pm 1, \pm 3, \dots$, Tabela 3.1. Para o Hamiltoniano XY(γ), e para cadeias com 8, 10 ou 12 sítios, calcularam-se os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ em três situações. Situação FC: versão fermiônica CC , estado inicial $\rho_0(S^z)$, cálculo analítico (3.20). Situação SFC: versão de spin, estado inicial do tipo produto direto $|M_l\rangle$, contido no subespaço do operador S^z associado à versão fermiônica CC , cálculo numérico (4.4). Situação SFN: versão de spin, estado inicial do tipo produto direto $|M_l\rangle$, contido no subespaço do operador S^z associado à versão fermiônica NCC , cálculo numérico (4.4).

Comparações entre as situações FC e SFC por um lado e entre as situações FC e SFN por outro, levam a resultados esperados e não esperados. Sendo o número de onda $Q = q \frac{2\pi}{N}$, para q par obtiveram-se coincidências, a menos de um fator de escala, entre os cálculos correspondentes às situações FC e SFC. Isso era esperado. Por outro lado, para q ímpar obtiveram-se coincidências, a menos de um fator de escala, entre os cálculos correspondentes às situações FC e SFN. Isso não era esperado. Esses resultados estão indicados na Tabela² 4.1. Exemplos estão mostrados na Figura 4.1 para uma cadeia com 10 sítios.

²Essa tabela também foi verificada para o Hamiltoniano Ising com campo transversal, XY(h, γ), $\gamma = 1$ e h arbitrário, para uma cadeia com 10 sítios.

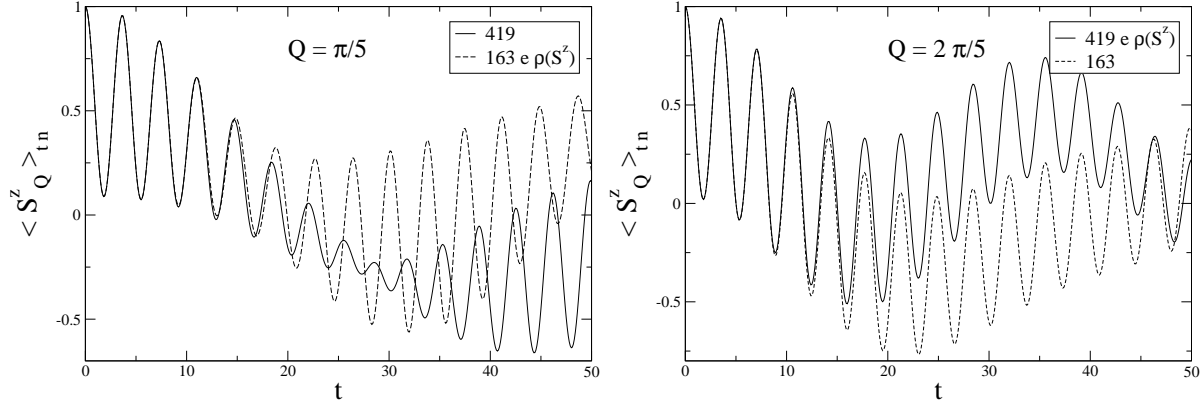


Figura 4.1: $\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0$ vs t . XY(γ), $N = 10$, $\gamma = 0.8$. Estados iniciais: $\rho_0(S^z)$, $|419\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$, contido no subespaço de S^z par, e $|163\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$, contido no subespaço de S^z ímpar. $|419\rangle$ e $|163\rangle$ estão associados respectivamente aos Hamiltonianos fermiônicos XY(γ): CC e NCC , Tabela 3.1. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) $Q = 1 \frac{2\pi}{N}$, (b) $Q = 2 \frac{2\pi}{N}$.

Na Figura 4.9 será mostrado que esses resultados também são válidos no subespaço de uma onda de spin, para sistemas com 120 ou 122 sítios. Retornando aos sistemas pequenos, acredita-se que os cálculos realizados estejam corretos por causa dos testes de consistência mencionados na página 76. Possivelmente os resultados não esperados para q ímpar resultam, em parte, do fato de o estado $\rho_0(S^z)$ corresponder a uma mistura de estados contidos em ambos subespaços de S^z .

A expectativa inicial era de que houvesse coincidências, a menos de um fator de escala, entre os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ sempre que o estado inicial na versão de spin correspondesse à versão fermiônica CC , e que não houvessem coincidências quando o estado inicial na versão de spin correspondesse à versão fermiônica NCC . Entre os estados iniciais do tipo produto direto escolhidos para a comparação estão os estados indicados na Tabela 4.2.

A independência da evolução de $\langle S_Q^z \rangle_t$ com o estado inicial a menos de um fator de escala (3.23) foi verificada para cada um dos dois conjuntos de estados iniciais, CC e NCC , indicados na Tabela 4.2. Os estados iniciais que apresentam alguma simetria de translação da rede são caracterizados por componentes de Fourier da magnetização nulas, $\langle S_Q^z \rangle_0 = 0$ para algum ou alguns $Q = q \frac{2\pi}{N}$. Por exemplo o estado parede $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$ apresenta todos os $\langle S_Q^z \rangle_t$ nulos, para q par, o estado $|\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$ apresenta todos os $\langle S_Q^z \rangle_t$ nulos, para q ímpar, o estado de Néel $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$ apresenta todos os $\langle S_Q^z \rangle_t$ nulos, exceto para $Q = \pi$, e o estado ferromagnético $|\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$ apresenta todos os $\langle S_Q^z \rangle_t$ nulos, exceto para $Q = 0$. Nesses casos verificou-se a prescrição dada pela expressão analítica (3.23): se $\langle S_Q^z \rangle_0 = 0$ então $\langle S_Q^z \rangle_t = 0$ para qualquer t .

Tabela 4.1: Coincidências — $\langle S_Q^z \rangle_t$. Versões fermiônicas e de spin.

Nesta Tabela se comparam as coincidências entre os cálculos dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ a partir dos estados iniciais $\rho_0(S^z)$ e de estados puros do tipo produto direto de auto-estados de S_j^z , $|M_l\rangle$, através respectivamente das soluções analítica do Hamiltoniano fermiônico CC e numérica do Hamiltoniano de spin, o qual pode corresponder a ambos Hamiltonianos fermiônicos CC e NCC . Os dois Hamiltonianos fermiônicos dependem do número de sítios N e a *paridade* do subespaço de S^z onde está o estado analisado, ver Tabela 3.1. Esperava-se que a coincidência entre os cálculos independesse do número de onda $Q = q\frac{2\pi}{N}$, e ocorresse sempre que o Hamiltoniano de spin correspondesse ao fermiônico CC . Porém, para q ímpar as coincidências e diferenças são inesperadas. $N = 8, 10, 12$.

esperadas			obtidas		
$q \backslash \mathcal{H}_{XY}$	CC	NCC	$q \backslash \mathcal{H}_{XY}$	CC	NCC
par	sim	não	par	sim	não
ímpar	sim	não	ímpar	não	sim

Tabela 4.2: Estados iniciais escolhidos para a obtenção da Tabela 4.1, no caso de $N = 10$.

As evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ a partir de cada um dos estados CC coincidem entre si a menos de um fator de escala. O mesmo vale para os estados NCC . Há alguns modos identicamente nulos para alguns estados com simetria de translação particular.

CC		NCC	
$ \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$
$ \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$
$ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$
	$ \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$		$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$

4.2.2 $\langle S_Q^z \rangle_t$, XY — $|M_l\rangle$ vs superposições de $|M_l\rangle$

Há estados puros definidos por superposições — formadas por estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$ restritos a um dos dois subespaços de S^z — a partir dos quais os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ coincidem, a menos de um fator de escala, ou não coincidem com as evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ a partir dos produtos diretos.

Não foi identificada uma característica que discrimina os dois tipos de superposições. Por exemplo, o fato de os estados $|M_l\rangle$ envolvidos na superposição terem ou não o mesmo autovalor do operador S^z não é determinante. Entretanto, as evoluções a partir de superposições de *dois* estados $|M_l\rangle$ em geral coincidem, a menos de um fator de escala, com as evoluções a partir dos produtos diretos $|M_l\rangle$, contidos no mesmo subespaço de S^z .

Há ainda exemplos de diferenças entre evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ calculadas a partir de estados do tipo produto direto e de estados construídos por superposições de produtos diretos, no subespaço de uma onda de spin, Figuras 4.10 e 4.11, seção 4.4.1. Por outro lado, na seção 4.3.3 serão mostrados certos tipos superposições, as quais desenvolvem, a menos de um fator de escala, a mesma evolução que os produtos diretos, para os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$.

Forma do operador $\rho_0(S^z)$

Os estados definidos pelo operador densidade $\rho_0(S^z)$, (3.12), correspondem a mistura de que tipo de estados puros? Essa é uma questão ainda não respondida. Algumas considerações serão feitas. Possivelmente $\rho_0(S^z)$ envolve estados contidos em todo o espaço de 2^N estados do sistema de N spins $\frac{1}{2}$, tanto estados associados à versão fermiônica CC como estados associados à versão fermiônica NCC , Tabela 3.1. A mistura inclui os estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$, auto-estados de S^z , e superposições de tais estados? Uma expansão em série do operador $\rho_0(S_j^z)$, para um sistema com apenas *um* sítio, indica que os estados descritos por tal operador são os auto-estados de S_j^z ,

$$\rho_0(S_j^z) = 1 + S_j^z. \quad (4.18)$$

Para spin $\frac{1}{2}$ as potências de S_j^z de ordem superior coincidem com a identidade ou com o próprio S_j^z . Uma questão a ser entendida é como $\rho_0(S^z)$ é construído a partir dos $\rho_0(S_j^z)$. Se for através de produtos diretos dos $\rho_0(S_j^z)$ correspondentes a todos os sítios j , então deve-se esperar que $\rho_0(S^z)$ seja uma mistura de estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$. Os resultados indicados na Tabela 4.1 apoiam essa conclusão. Entretanto, o fato de haver superposições a partir das quais desenvolvem-se evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ coincidentes, a menos de um fator de escala, com as correspondentes evoluções a partir de produtos diretos $|M_l\rangle$, seção 4.3.3, leva a suposição de que o estado do tipo $\rho_0(S^z)$ possa incluir também algumas dessas superposições.

4.2.3 $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$ XYZ — Testes de Consistência

Finalmente, foram feitos testes de consistência, os quais consistiram na comparação entre evoluções temporais das três componentes do spin, $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$, $\alpha = x, y, z$ para Hamiltonianos planares diferentes porém equivalentes, (2.33) e (2.34), e para estados iniciais diferentes porém equivalentes.

Tomaram-se por estados iniciais três tipos de produtos diretos, auto-estados dos operadores S_j^x , S_j^y e S_j^z . Todos foram escritos na base formada pelos produtos diretos dos auto-estados dos S_j^z , através das transformações,

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle^x &= (|\uparrow\rangle^z + |\downarrow\rangle^z)/\sqrt{2}, & |\downarrow\rangle^x &= (|\uparrow\rangle^z - |\downarrow\rangle^z)/\sqrt{2}, \\ |\uparrow\rangle^y &= (|\uparrow\rangle^z + i|\downarrow\rangle^z)/\sqrt{2}, & |\downarrow\rangle^y &= (|\uparrow\rangle^z - i|\downarrow\rangle^z)/\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

No teste de consistência verificam-se as igualdades das evoluções temporais indicadas nas próximas linhas. Modos longitudinais a partir de estados iniciais preparados longitudinalmente,

$$\langle \psi_0^z | S_Q^z(t) | \psi_0^z \rangle_t^{XY} = \langle \psi_0^x | S_Q^x(t) | \psi_0^x \rangle_t^{YZ} = \langle \psi_0^y | S_Q^y(t) | \psi_0^y \rangle_t^{ZX}, \quad (4.20)$$

modos longitudinais a partir de estados iniciais preparados transversalmente,

$$\langle \psi_0^y | S_Q^z(t) | \psi_0^y \rangle_t^{XY} = \langle \psi_0^z | S_Q^x(t) | \psi_0^z \rangle_t^{YZ} = \langle \psi_0^x | S_Q^y(t) | \psi_0^x \rangle_t^{ZX}, \quad (4.21)$$

modos transversais a partir de estados iniciais preparados longitudinalmente,

$$\langle \psi_0^z | S_Q^y(t) | \psi_0^z \rangle_t^{XY} = \langle \psi_0^x | S_Q^z(t) | \psi_0^x \rangle_t^{YZ} = \langle \psi_0^y | S_Q^x(t) | \psi_0^y \rangle_t^{ZX}, \quad (4.22)$$

modos transversais a partir de estados iniciais preparados transversalmente,

$$\langle \psi_0^y | S_Q^y(t) | \psi_0^y \rangle_t^{XY} = \langle \psi_0^z | S_Q^z(t) | \psi_0^z \rangle_t^{YZ} = \langle \psi_0^x | S_Q^x(t) | \psi_0^x \rangle_t^{ZX}. \quad (4.23)$$

Os índices XY, YZ e ZX indicam os Hamiltonianos planares (2.34). Em cada caso a direção longitudinal é aquela correspondente à componente do spin que não está presente no Hamiltoniano.

A verificação das igualdades (4.20), (4.21), (4.22) e (4.23) constitui um teste de consistência significativo, pois na mesma base dos estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$ (A.3), auto-estados dos operadores S_j^z , cada um dos operadores S_Q^α têm elementos de matriz diferentes, cada um dos estados $|\psi_0^\alpha\rangle$ são expressos de maneira diferente e os Hamiltonianos são expressos por matrizes diferentes. Os casos específicos testados foram,

$$N = 10, \quad a = 1.8, \quad b = 0.2, \quad c = 0, \quad |\psi_0^\alpha\rangle = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle^\alpha \\ |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle^\alpha \end{cases}, \quad (4.24)$$

onde a , b e c estão definidos em (2.33).

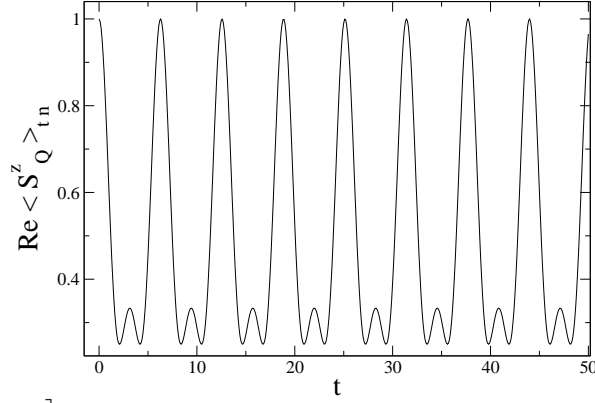


Figura 4.2: $\text{Re} \left[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0 \right]$ vs t . Heisenberg isotrópico XXX, $\Delta = 1$, $J^{(1)} = 1$, $N = 4$, $Q = \frac{1}{2}\pi$. Estado inicial, $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . O tempo t está em unidades arbitrárias. Evolução periódica da magnetização. Freqüências de Rabi.

$$\langle S_Q^z \rangle_t \text{ XXX}, N = 4$$

Outro limite calculado para fins de validação foi o Heisenberg isotrópico. Foram realizados os cálculos numéricos à mão e através do algoritmo implementado em fortran para a cadeia com quatro sítios. É curioso notar que a evolução da magnetização é periódica, reversível, para o sistema com quatro sítios, apresentando freqüências de Rabi, Figura 4.2. Isso decorre do fato de todos os autovalores distintos $-2, -1, 0, 1$ serem comensuráveis entre si. Para outros estados iniciais analisados também se desenvolvem evoluções periódicas.

4.3 XXZ — $\langle S_Q^z \rangle_t$, autovalor nulo de S^z

Deste ponto em diante será tratada a interação de Heisenberg XXZ. Como já foi dito, o objetivo inicial deste trabalho consiste em analisar-se a dinâmica da magnetização promovida pelo Hamiltoniano XXZ, na presença e na ausência de um *gap* no espectro de energia. Esse Hamiltoniano pode ou não apresentar um *gap* (2.7) no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , conforme o valor do parâmetro de anisotropia da integral de troca, Δ (2.6). A conjectura inicial pressupunha a existência de modos particulares da magnetização, apenas na presença de *gap*, cuja relaxação fosse crítica, mais lenta que a relaxação dos demais modos, pelo menos para estados iniciais que tivessem semelhança com os estados $\rho_0(S^z)$, por exemplo, os produtos diretos de auto-estados de S_j^z . Entretanto, os resultados obtidos nesta seção indicam que a expectativa inicial não se verifica para a maioria dos estados iniciais separáveis contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , pois a partir desses estados emergem processos muito rápidos de relaxação independentemente da presença do *gap*. Apenas para estados do tipo parede se observa relaxação mais lenta na presença do *gap*, mas não se trata de uma criticalidade análoga àquela

presente na família XY, esquematizada na Figura 3.2.

As evoluções temporais dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ geradas pelo Hamiltoniano XXZ podem ser analisadas separadamente nos subespaços definidos por autovalores distintos de S^z por causa do desacoplamento indicado em (4.7). Foram escolhidos para análise os subespaços definidos pelos seguintes autovalores de S^z : nulo, $\frac{N}{2} - 2$ e $\frac{N}{2} - 1$, quando expressos em unidades de \hbar . Esses dois últimos são os subespaços de duas ondas e uma onda de spin. O subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z foi escolhido porque supõe-se que seja aquele que possa exibir comportamento mais complexo. Os subespaços de uma e duas ondas foram escolhidos porque são os mais simples de serem analisados e onde se atingem sistemas com maiores números de sítios. Na ausência de campos magnéticos externos refere-se indistintamente a qualquer um dos dois subespaços de uma onda de spin, cujos autovalores são $\pm (\frac{N}{2} - 1)$, e a qualquer um dos dois subespaços de duas ondas de spin, cujos autovalores são $\pm (\frac{N}{2} - 2)$. Através da diagonalização direta foi possível analisar cadeias com 12, 72 e 3360 sítios, respectivamente. Entretanto, a maior parte dos cálculos para o subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z foi feita para 10 sítios, devido ao tempo de processamento computacional, e para subespaço de uma onda de spin foi feita para 1200 sítios, porque foi o suficiente para se analisar o comportamento de sistemas grandes.

Para as cadeias de spins com simetria de translação, repartiu-se o subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z em subespaços menores, definidos pelas simetrias espaciais descritas pelo grupo D_N , (2.12). Isso permitiu a diagonalização de cadeias com até 14 sítios. O uso da simetria espacial no subespaço de duas ondas é uma possibilidade que não foi explorada. Não se utilizaram as simetrias espaciais para a diagonalização no subespaço de uma onda de spin, porque sua dimensão cresce apenas linearmente com o número de sítios da cadeia.

Os cálculos referentes ao subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z estão mostrados nesta seção, 4.3.2. Os cálculos realizados nos subespaços de uma e de duas ondas de spin serão apresentados nas seções 4.4 e 4.5. Em ambos introduziram-se impurezas. No subespaço de uma onda, a presença de impurezas leva a comportamentos que podem ser compreendidos para muitos valores dos parâmetros Δ e $J^{(\text{imp})}$ do Hamiltoniano e para muitos estados iniciais, por outro lado no subespaço de duas ondas emergem comportamentos muito irregulares ao se variar Δ , $J^{(\text{imp})}$ e o estado inicial, de maneira que tais resultados não serão apresentados.

4.3.1 XXZ — força bruta

Extinção rápida da magnetização

O cálculo da evolução temporal dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ através da diagonalização direta na base de estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$, (A.3), desenvolvida até aqui, no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , ficou limitada a sistemas pequenos. Atingiram-se sistemas com até 12 sítios, porém devido ao tempo de processamento computacional a maior parte dos cálculos foi feita para sistemas com 10 sítios:

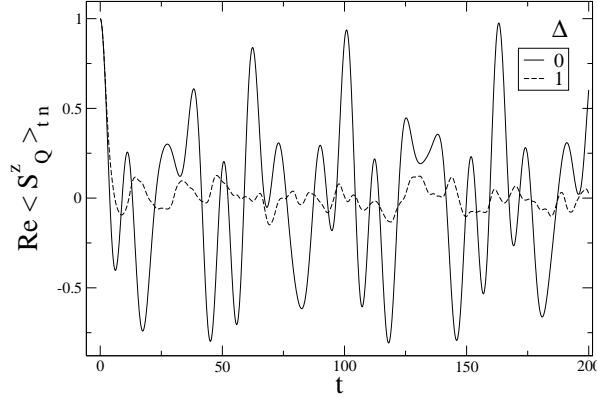


Figura 4.3: $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t . XXZ, $J^{(1)} = 1$, $\Delta = 0, 1$, $N = 10$, $Q = \frac{1}{5}\pi$. Estado inicial, $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . O tempo t está em unidades arbitrárias. Extinção rápida para $\Delta \neq 0$.

~ 10 horas vs ~ 4 minutos. A partir de estados do tipo produto direto, não se discerniram processos de relaxação amortecidos por uma lei de potência, e muito menos discerniu-se a criticalidade análoga à da Figura 3.2, quando há *gap* no espectro de energia. Ao contrário, as dinâmicas geradas pelo Hamiltoniano de Heisenberg a partir desses estados iniciais são descritas por processos bastante rápidos de extinção da magnetização, Figura 4.3.

Conjectura-se que essa relaxação rápida também será observada no limite de cadeias grandes, e que não seja uma particularidade do fato de o sistema ser pequeno. Essa conjectura está baseada na suposição de que o mais importante para se atingir o comportamento de sistemas grandes é a dimensão do subespaço de estados acessíveis à evolução temporal do estado inicial, ao invés do número de sítios do sistema. Uma idéia preliminar de qual seja a dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução temporal a partir de um produto direto é dada pela própria dimensão do subespaço. A dimensão desse subespaço cresce muito rapidamente com o número de sítios N da cadeia, uma vez que é dada pelo número combinatório $(N \choose N/2)$. Para cadeias com 10 sítios tal dimensão é $(10 \choose 5) = 252$. Processos rápidos de extinção da magnetização também foram verificados no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z de cadeias com 14 sítios, cuja dimensão é $(14 \choose 7) = 3432$. A conjectura enunciada constitui um dos resultados mais significativos deste trabalho. Ela será discutida na seção 4.3.4 e no Capítulo de Conclusões, seção 6.2.5.

Desaparecimento das Freqüências de Rabi

As evoluções temporais da magnetização na cadeia com 10 sítios, a partir de quaisquer estados do tipo produto direto contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , são irreversíveis.³ Desaparecem as freqüências de Rabi, como mostrado na Figura 4.3.

³Os dois estados ferromagnéticos, os quais estão fora do subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , são auto-estados do Hamiltoniano XXZ, são do tipo produto direto, e desenvolvem uma evolução reversível trivial.

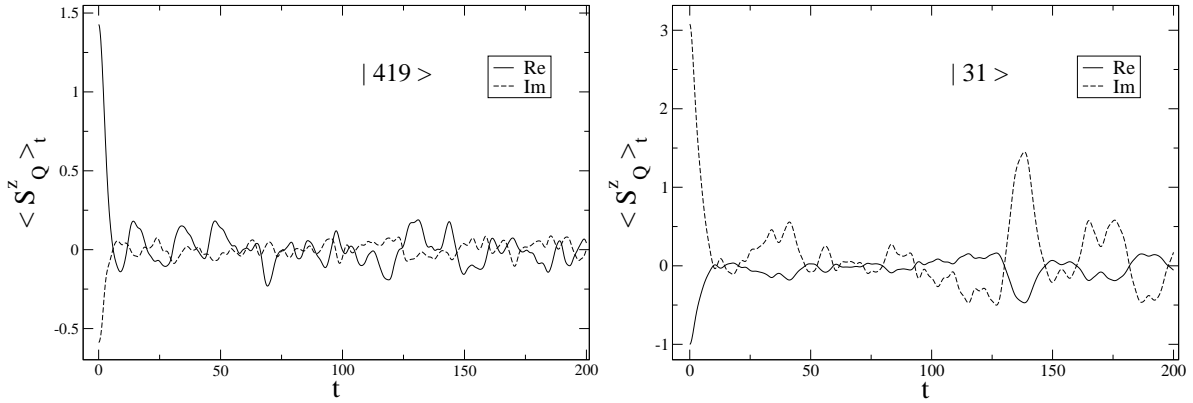


Figura 4.4: $\langle S_Q^z \rangle_t$ vs t . Heisenberg isotrópico, XXX, $\Delta = 1$. $J^{(1)} = 1$, $N = 10$, $Q = \frac{1}{5}\pi$. Estados iniciais contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) $|419\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$. (b) $|31\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$. Forte dependência da dinâmica com o estado inicial.

A medida que o número de sítios cresce, aumentam os graus de liberdade e a dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução do estado inicial, e o Hamiltoniano apresenta muitos autovalores incomensuráveis entre si. A evolução periódica da magnetização caracterizada por frequências de Rabi desaparece quando se toma, em sistemas com mais com quatro sítios, um estado inicial arbitrário, pois associado a ele surgem frequências incomensuráveis entre si. Adiante será mostrado que em sistemas maiores, emerge evolução periódica, reversível, da magnetização apenas para estados iniciais muito particulares como por exemplo, superposições de dois auto-estados não degenerados do sistema, Figuras 4.5 (c) e (d).

Dependência com o estado inicial

A dinâmica gerada pelo Hamiltoniano de Heisenberg é mais dependente do estado inicial que a dinâmica gerada pelo Hamiltoniano XY. Na Figura 4.4 estão mostradas evoluções a partir de dois estados iniciais do tipo produto direto diferentes. Tais evoluções não diferem entre si apenas por um fator de escala como seria o caso se o Hamiltoniano fosse o XY, (3.23) e Tabela 4.2. Além disso as partes real e imaginária do modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ da Figura 4.4 (a) não são proporcionais entre si, como seria o caso se o Hamiltoniano fosse o XY, (3.23). Na Figura 4.4 (b) as partes real e imaginária do modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ são proporcionais entre si, o que possivelmente decorre de alguma particularidade do estado inicial do tipo parede.

4.3.2 XXZ — simetrias espaciais

O algoritmo de cálculo dos modos longitudinais $\langle S_Q^z \rangle_t$ na base dos estados $|P_r^\beta\rangle$ é diferente do algoritmo de cálculo na base dos produtos diretos, seção 4.1. Maiores detalhes deste cálculo, para o caso de uma cadeia com quatro spins, serão mostrados na seção B.2.

O estado inicial puro é expresso pela superposição,

$$|\psi_0\rangle = \sum_{r,\beta} C_r^\beta |P_r^\beta\rangle, \quad (4.25)$$

onde o índice r simboliza o conjunto dos dois índices μ e i de uma Representação Irredutível do grupo de simetria espacial que comuta com o Hamiltoniano e de uma coluna dessa RI, como foi explicado após (2.30). No algoritmo desenvolvido, os coeficientes C_r^β podem ser escolhidos como sendo reais ou complexos. Um estado puro pode ser expresso por qualquer uma das formas (4.1) ou (4.25). Seleccionaram-se estados do tipo produto direto como $|M_l\rangle$. Um estado do tipo produto direto é expresso por até $g = 2N$ estados do tipo $|P_r^\beta\rangle$, onde g é a ordem do grupo de simetria espacial, (2.12),

$$|\psi_0^l\rangle = |M_l\rangle = \sum_{r,\beta} C_r^\beta(l) |P_r^\beta\rangle. \quad (4.26)$$

Entre os possíveis g estados resultantes da decomposição de $|M_l\rangle$ estão *um* estado associado a cada uma das quatro RI de dimensão *um*, e até *dois* estados definidos por cada uma das $N - 2$ colunas das RI de dimensão *dois*: $g = 4 + 2(N - 2)$. Deve-se lembrar que $g = 2N$ é muito menor que a dimensão do subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , ($N N/2$). Seleccionaram-se também superposições de um, dois ou três estados do tipo $|P_r^\beta\rangle$. As escolhas de tais superposições levaram em consideração uma regra de seleção, discutida adiante nesta seção, entre os índices r e os números de onda Q .

A expressão de $\langle S_Q^z \rangle_t$ (3.6) pode ser escrita em uma forma análoga à de (4.2) e (4.3).

$$\langle S_Q^z \rangle_t = \sum_{r\zeta, r'\zeta'} A_{r\zeta, r'\zeta'}^{(z, Q, \psi_0)} e^{i\omega_{r\zeta, r'\zeta'} t}, \quad (4.27)$$

$$A_{r\zeta, r'\zeta'}^{(z, Q, \psi_0)} = \langle \psi_0 | r' \zeta' \rangle \langle r' \zeta' | S_Q^z | r \zeta \rangle \langle r \zeta | \psi_0 \rangle, \quad \omega_{r\zeta, r'\zeta'} = E_{r'\zeta'} - E_{r\zeta}, \quad (4.28)$$

a qual pode ser reescrita de maneira análoga às expressões (4.4) e (4.5), com apenas um índice de soma,

$$\langle S_Q^z \rangle_t = \sum_l B_l^{(z, Q, \psi_0)} \exp \left(i \omega_l^{(z, Q, \psi_0)} t \right), \quad (4.29)$$

$$B_l^{(z, Q, \psi_0)} = \sum_{r\zeta, r'\zeta'}^{(\omega_l = \omega_{r\zeta, r'\zeta'})} A_{r\zeta, r'\zeta'}^{(z, Q, \psi_0)}. \quad (4.30)$$

Os elementos de matriz $\langle r' \zeta' | S_Q^z | r \zeta \rangle$ foram calculados em todo o subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z ,

$$\langle r' \zeta' | S_Q^z | r \zeta \rangle = \sum_{\beta'} \sum_{\beta} U_{r'\zeta'}^{\beta'} U_{r\zeta}^{\beta} \langle P_{r'}^{\beta'} | S_Q^z | P_r^{\beta} \rangle, \quad (4.31)$$

$$\langle P_{r'}^{\beta'} | S_Q^z | P_r^{\beta} \rangle = \sum_l b_{r'}^{\beta', l} b_r^{\beta, l} \langle M_l | S_Q^z | M_l \rangle. \quad (4.32)$$

Tanto os coeficientes $b_r^{\beta,l}$ (2.30) como os U_r^β (2.35) são reais. Nas duas bases definidas pelos estados $|P_r^\beta\rangle$ e $|r\zeta\rangle$, as matrizes de S_Q^z têm a mesma forma de blocos, em geral situados fora da diagonal. Essas matrizes são simétricas e seus elementos não nulos são complexos em geral.

No algoritmo construído, os elementos de matriz $\langle r'\zeta|S_Q^z|r\zeta\rangle$ e as amplitudes $A_{r\zeta,r'\zeta'}^{(z,Q,\psi_0)}$ são calculados no mesmo passo, a partir dos elementos de matriz $\langle P_{r'}^{\beta'}|S_Q^z|P_r^\beta\rangle$ e dos produtos escalares $\langle r\zeta|\psi_0\rangle$. Para um estado inicial do tipo produto direto em uma cadeia com 14 sítios, esse passo e a somatória das exponenciais (4.29) requerem mais tempo de computação, algumas horas para todos os Q , do que todos os outros passos juntos: montagem das bases de estados $|M_l\rangle$ e $|P_r^\beta\rangle$, diagonalização da matriz do Hamiltoniano, alguns segundos, e cálculo de $\langle P_{r'}^{\beta'}|S_Q^z|P_r^\beta\rangle$ para todos os Q , alguns minutos.

As expressões apresentadas nesta seção foram obtidas tomando-se $J^{(1)} = 1$, para o Hamiltoniano (2.1), e $\hbar = 1$. O tempo t está em unidades arbitrárias. O Hamiltoniano de Heisenberg XXZ corresponde àquele apresentado em (2.1) com $\xi_x = \xi_y$.

Regra de Seleção para S_Q^z

Há uma *regra de seleção*, constatada no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , envolvendo os índices r e r' e o número de onda Q , indicando blocos nulos e não nulos, situados na diagonal ou fora da diagonal, das matrizes de cada S_Q^z em ambas bases definidas pelas simetrias das RI e de suas colunas, tanto na base definida pelos estados $|P_r^\beta\rangle$, como naquela definida pelos estados $|r\zeta\rangle$. Na maioria dos blocos, quer seja naqueles situados na diagonal, quer seja naqueles situados fora da diagonal, o operador S_Q^z referente a um certo Q tem todos elementos de matriz nulos. Essa regra de seleção foi constatada numericamente através do cálculo explícito de todos os elementos de matriz $\langle P_{r'}^{\beta'}|S_Q^z|P_r^\beta\rangle$. A Tabela 4.3 ilustra o caso particular para $N = 10$. Infere-se a partir dessa regra e do fato de o operador S_Q^z corresponder a um processo de transferência de momento Q , que os estados $|P_r^\beta\rangle$ ou $|r\zeta\rangle$ têm momento definido. De fato, tais estados foram obtidos através das simetrias espaciais da cadeia de spin com condições de contorno periódicas, as quais envolvem simetrias de translação.

O estado inicial escrito na forma (4.25) evidencia o efeito da regra de seleção sobre a evolução de cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ da magnetização. A evolução pode ser nula ou não nula. Se for não nula pode restringir-se ou não a apenas uma fração dos estados do subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . Tal fração é definida pela simetria do estado inicial e pelo número de onda Q . Há um desacoplamento das evoluções dos modos longitudinais $\langle S_Q^z \rangle_t$ análogo à (4.7). Para que a evolução de um modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ particular seja não nula, o estado inicial precisa conter estados do tipo $|P_r^\beta\rangle$ cujos índices r satisfaçam a regra de seleção para o número de onda Q de interesse. A condição necessária pode ser satisfeita por apenas um índice r , se a ele corresponder um bloco de S_Q^z situado na diagonal, ou por dois ou mais índices r e r' , se a eles corresponderem blocos de S_Q^z situados fora da diagonal.

Por outro lado, a evolução de um modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ não irá envolver estados do tipo $|P_r^\beta\rangle$ definidos por

Tabela 4.3: Regra de Seleção. $N = 10$. Autovalor nulo de S^Z .

Esta Tabela indica os blocos de matriz não nulos de cada operador S_Q^z em qualquer uma das bases $|P_r^\beta\rangle$ ou $|r\zeta\rangle$. Nessas bases o operador S_Q^z é simétrico, de maneira que os blocos não nulos do triângulo superior da matriz correspondem aos do triângulo inferior. Os blocos não nulos são definidos pelas simetrias do grupo espacial que comuta com o Hamiltoniano (2.12). Os números de onda Q estão expressos em unidades de $\frac{2\pi}{N}$. Para cada Q exibido inclui-se também $2\pi - Q$. Os blocos não nulos das matrizes de cada operador S_Q^z preenchem quase toda a Tabela. Trivialmente, no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , todos os elementos de matriz são nulos para $Q = 0$, ou 2π , pois $S_{Q=0}^z = S^z$. Cada bloco não nulo de S_Q^z na base dos estados $|P_r^\beta\rangle$ é bastante esparço, o número de elementos não nulos é proporcional às dimensões lineares do bloco, enquanto que na base dos auto-estados há muito mais elementos não nulos. Por exemplo, no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , cuja dimensão é $n = (N/2)$, para $N = 10$ ou 14 há até cerca de $3n$ elementos de matriz não nulos para cada operador S_Q^z na base dos $|P_r^\beta\rangle$ e da ordem de n^2/N na base dos auto-estados $|r\zeta\rangle$.

S_Q^z	$\Gamma^{I,1}$	$\Gamma^{I,2}$	$\Gamma^{I,3}$	$\Gamma^{I,4}$	$\Gamma_{i=1}^{II,1}$	$\Gamma_{i=1}^{II,2}$	$\Gamma_{i=1}^{II,3}$	$\Gamma_{i=1}^{II,4}$	$\Gamma_{i=2}^{II,1}$	$\Gamma_{i=2}^{II,2}$	$\Gamma_{i=2}^{II,3}$	$\Gamma_{i=2}^{II,4}$
$\Gamma^{I,1}$	—											
$\Gamma^{I,2}$	—	—										
$\Gamma^{I,3}$	—	5	—									
$\Gamma^{I,4}$	5	—	—	—								
$\Gamma_{i=1}^{II,1}$	1	1	4	4	2							
$\Gamma_{i=1}^{II,2}$	2	2	3	3	1, 3	4						
$\Gamma_{i=1}^{II,3}$	3	3	2	2	2, 4	1	4					
$\Gamma_{i=1}^{II,4}$	4	4	1	1	3	2, 4	1, 3	2				
$\Gamma_{i=2}^{II,1}$	1	1	4	4	2	1, 3	2, 4	3, 5	2			
$\Gamma_{i=2}^{II,2}$	2	2	3	3	1, 3	4	1, 5	2, 4	1, 3	4		
$\Gamma_{i=2}^{II,3}$	3	3	2	2	2, 4	1, 5	4	1, 3	2, 4	1	4	
$\Gamma_{i=2}^{II,4}$	4	4	1	1	3, 5	2, 4	1, 3	2	3	2, 4	1, 3	2

um índice r , se o estado inicial não contiver pelo menos um estado definido por esse mesmo índice r , ou ainda que contenha tal estado, se não contiver pelo menos outro estado cujo índice r' satisfaça a regra de seleção para os dados Q e r . As considerações apresentadas nesta seção sobre as evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ decorrem da regra de seleção e dos produtos escalares do estado inicial com auto-estados, como prescreve (4.28).

Outra característica, constatada numericamente, dos elementos de matriz $\langle P_{r'}^{\beta'} | S_Q^z | P_r^\beta \rangle$ (4.31) de um bloco não nulo definido por r e r' é que todos os elementos não nulos daquele bloco têm a mesma fase complexa. Uma consequência disso e do fato de todos os auto-estados terem sido determinados apenas com coeficientes reais é que nessa base de auto-estados todos os elementos de matriz $\langle r' \zeta' | S_Q^z | r \zeta \rangle$, referentes ao mesmo número de onda Q e ao mesmo bloco definido pelos índices r e r' , também têm a mesma fase complexa. Além disso, deve-se notar que os elementos não nulos da matriz de S_Q^z , no bloco transposto definido pelos índices r' e r , têm a mesma fase complexa que os elementos do bloco r e r' , porque trata-se de um operador simétrico. Essa característica foi utilizada no algoritmo de cálculo.

Como consequência, se para um determinado estado inicial e um número de onda Q a regra de seleção prescrever a dinâmica restrita a apenas um par de blocos da matriz de S_Q^z , sendo um bloco obtido pela transposição do outro, então a evolução temporal de $\langle S_Q^z \rangle_t$ será caracterizada por uma única fase complexa para todo t . $\text{Re}\langle S_Q^z \rangle_t$ e $\text{Im}\langle S_Q^z \rangle_t$ serão proporcionais entre si, como ocorre no caso da dinâmica do modelo XY (3.23) a partir do estado inicial $\rho_0(S^z)$. A proporcionalidade entre as partes real e imaginária de $\langle S_Q^z \rangle_t$ foi verificada por exemplo para,

$$\begin{aligned} N = 14, \quad Q = 2 \frac{2\pi}{N}, \quad r: \Gamma_{i=1}^{\text{II},1}; \text{ qualquer } \Delta, \\ |P_r^\beta\rangle, \quad \beta = 2, 100, 245, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|P_r^{\beta_1}\rangle + |P_r^{\beta_2}\rangle), \quad (\beta_1, \beta_2) = (1, 2), (1, 100), (100, 101). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ desenvolvidos a partir dos estados citados acima são nulos para quase todos os Q , exceto para dois particulares Q_r e $2\pi - Q_r$, $Q_r = 2 \frac{2\pi}{N}$.

Ondas Estacionárias

Quando há apenas dois modos não nulos $\langle S_{Q_r}^z \rangle_t$ e $\langle S_{2\pi-Q_r}^z \rangle_t$, as médias da magnetização em cada sítio $\langle S_j^z \rangle_t$, (3.9), em todos os sítios j oscilam em fase. Trata-se de uma espécie de *onda estacionária*, Figura 4.5. Essa estrutura não aparece quando há mais de dois pares modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ e $\langle S_{2\pi-Q}^z \rangle_t$ não nulos. A onda estacionária resulta de uma simetria particular do estado inicial, pelo menos para o Hamiltoniano XXZ. Entre os estados iniciais analisados na Figura 4.5, era esperado que aquelas superposições que envolvem apenas a simetria espacial $\Gamma_{i=1}^{\text{II},1}$, Figuras 4.5 (b) e (d), satisfizessem a condição para desenvolver a onda estacionária, pois somente pode desenvolver um par de modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ não nulos, $Q = 2 \frac{\pi}{7}$ e $Q = 12 \frac{\pi}{7}$, como prescreve a regra de seleção dos elementos de matriz do operador S_Q^z para 14 sítios, não mostrada no texto. Ps outros dois estados, Figura 4.5 (a) e (c), poderiam em princípio desenvolver dois pares de

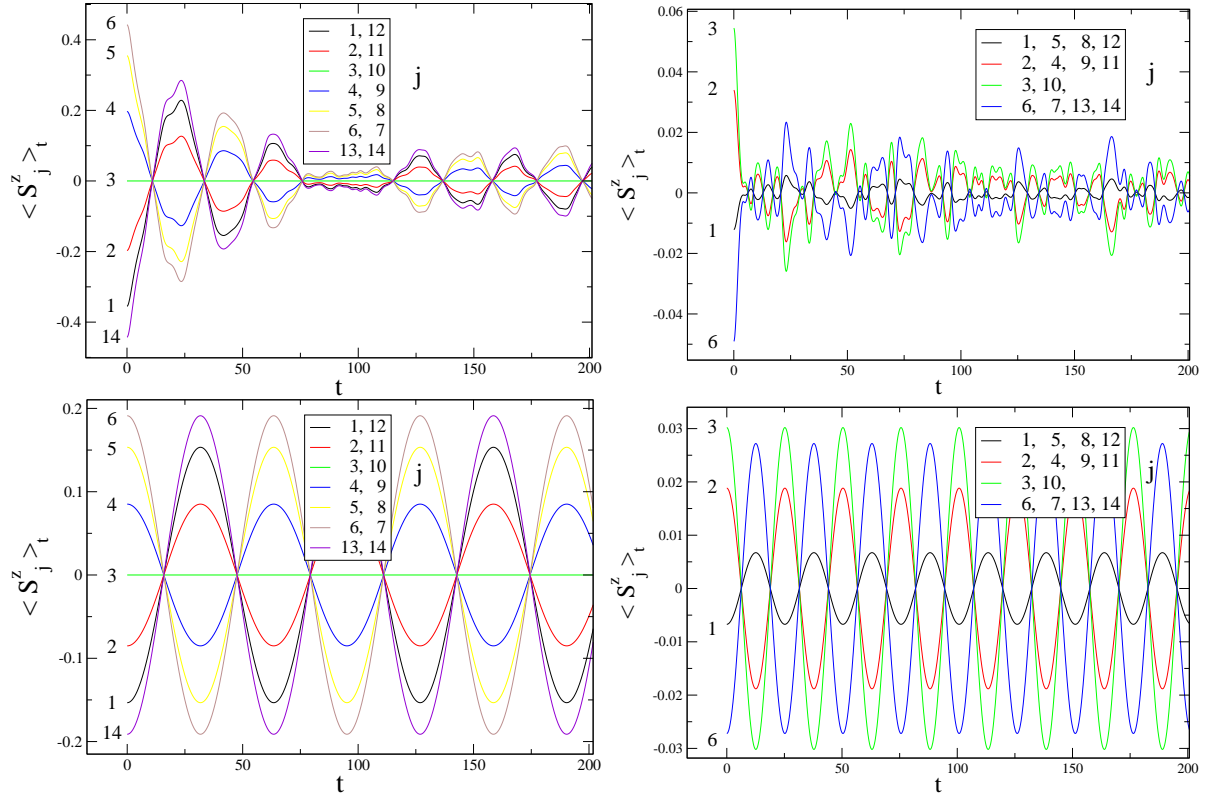


Figura 4.5: Ondas Estacionárias. Elas podem ser descritas notando-se que os valores médios $\langle S_j^z \rangle_t$ em todos os sítios oscilam em fase. $\langle S_j^z \rangle_t$ vs t , $j = 1, 2, \dots, 14$. $N = 14$. XXZ, $J^{(1)} = 1$, $\Delta = 1.0$. O tempo t está em unidades arbitrárias. Estados iniciais. Superposições de dois estados do tipo $|P_r^\beta\rangle$: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|P_{r_1}^{\beta_1}\rangle + |P_{r_2}^{\beta_2}\rangle)$, (a) $r_1: \mu = I, 1, \beta_1 = 1, r_2: \mu = II, 1; i = 1, \beta_2 = 1$. (b) $r_1: \mu = II, 1; i = 1, \beta_1 = 1, r_2: \mu = II, 1; i = 1, \beta_2 = 100$. Superposições de dois auto-estados: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|r_1 \zeta_1\rangle + |r_2 \zeta_2\rangle)$, (c) $r_1: \mu = I, 1, \zeta_1 = 133, r_2: \mu = II, 1; i = 1, \zeta_2 = 245$. (d) $r_1: \mu = II, 1; i = 1, \zeta_1 = 1, r_2: \mu = II, 1; i = 1, \zeta_2 = 2$. Os índices ζ_i indicam auto-estados em ordem crescente de energia em cada subespaço definido pela simetria espacial r . Para (a) e (c) apenas os modos com $Q = \frac{\pi}{7}$ e $Q = 13\frac{\pi}{7}$ são não nulos, e há ‘nós’ nos sítios 3 e 10. Para (b) e (d) apenas os modos com $Q = 2\frac{\pi}{7}$ e $Q = 12\frac{\pi}{7}$ são não nulos, e não há ‘nós’. As evoluções a partir das superposições dos dois auto-estados são reversíveis. Para esses quatro estados iniciais as partes real e imaginária de $\langle S_Q^z \rangle_t$ são proporcionais.

modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ não nulos $Q = \frac{\pi}{7}$, $Q = 13\frac{\pi}{7}$, $Q = 2\frac{\pi}{7}$ e $Q = 12\frac{\pi}{7}$, como prescreve a regra de seleção para $N = 14$. De fato, esse é o caso para a maior parte das superposições de dois estados do tipo $|P_r^\beta\rangle$ com $r_1: \mu = I, 1$ e $r_2: \mu = II, 1; i = 1$. De maneira que o fato de cada um deles ter desenvolvido uma onda estacionária decorre de uma particularidade além da simetria espacial, pois esses estados são superposições de estados do tipo parede. Por outro lado, a maior parte das superposições analisadas de dois auto-estados desenvolve evolução temporal nula para todos os números de onda Q , apesar de a regra

de seleção permitir a existência de algum modo não nulo. Dessa maneira, as ondas estacionárias exibidas nas Figuras 4.5 (c) e (d) são casos pouco freqüentes.

As evoluções temporais exibidas na Figuras 4.5 (a), e especialmente na Figura (c), apresentam analogias com uma corda vibrante. Entretanto há diferenças, pois a cadeia de spins finita é um sistema discreto, e a corda vibrante um sistema contínuo. A corda vibrante está submetida a um vínculo externo que mantém fixas as suas extremidades, enquanto que na cadeia de spins desacoplada do ambiente externo o vínculo parece ser decorrente de uma simetria particular do próprio estado inicial.

As evoluções a partir das superposições dos dois auto-estados analisados nas Figuras 4.5 (c) e (d) são reversíveis, periódicas. Tal reversibilidade decorre trivialmente a partir da equação de Schrödinger. Não somente o sistema com quatro sítios apresenta reversibilidade, mas o de quatorze também. A diferença é que no sistema com quatro sítios o estado inicial pode ser arbitrário, ao invés de ser de um tipo bastante particular.

Compatibilidade entre dois algoritmos

A correta implementação do algoritmo de cálculo dos modos longitudinais $\langle S_Q^z \rangle_t$, feita através do uso das simetrias espaciais (4.27), foi verificada por meio de comparações com o correspondente algoritmo da ‘força bruta’, (4.2), para cadeias com 10 sítios e tomando-se como estados iniciais: $|M_l\rangle$, (4.26), $|P_r^\beta\rangle$, (2.30), superposições de pares de estados do tipo $|P_r^\beta\rangle$ e superposições de pares de auto-estados do Hamiltoniano.

4.3.3 $\langle S_Q^z \rangle_t$, XX — $|M_l\rangle$, $|P_r^\beta\rangle$ e $\rho_0(S^z)$

Quando a dinâmica é gerada pelo Hamiltoniano planar isotrópico XX, $\Delta = 0$, há coincidências, a menos de um fator de escala, entre as evoluções temporais de modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ não nulos, para um dado número de onda Q , a partir de diferentes estados iniciais. Tais estados iniciais são: os produtos diretos $|M_l\rangle$, estados do tipo 1, por exemplo (2.26), alguns do tipo 2, por exemplo (2.28), mas não todos, e algumas superposições definidas por,

$$e^{i\phi} |P_r^\beta\rangle, e^{i\phi} \frac{1}{\sqrt{2}} (|P_{r_1}^{\beta_1}\rangle + |P_{r_2}^{\beta_2}\rangle), \text{ ou } e^{i\phi} \frac{1}{\sqrt{3}} (|P_{r_1}^{\beta_1}\rangle + |P_{r_2}^{\beta_2}\rangle + |P_{r_3}^{\beta_3}\rangle), \quad (4.34)$$

onde se impõe a restrição de que todas as componentes $|P_{r_i}^{\beta_i}\rangle$, dos estados (4.34), sejam superposições dos mesmos estados do tipo produto direto. Por exemplo, para $N = 10$, $|P_{r_1}^{\beta_1}\rangle = P^{I,1} |93\rangle$ e $|P_{r_2}^{\beta_2}\rangle = P_{i=1}^{II,1} |93\rangle$, (2.26). Deve-se lembrar que os estados iniciais (4.34) desenvolvem evoluções não nulas apenas para números de onda Q especificados pela regra de seleção já discutida, enquanto que um estado do tipo produto direto pode desenvolver evoluções não nulas para muitos Q .

Por outro lado, desaparecem as coincidências entre as evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ não nulos, ao se introduzirem fases relativas para as componentes,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|P_{r_1}^{\beta_1}\rangle + e^{i\phi_2} |P_{r_2}^{\beta_2}\rangle), \text{ ou } \frac{1}{\sqrt{3}} (|P_{r_1}^{\beta_1}\rangle + e^{i\phi_2} |P_{r_2}^{\beta_2}\rangle + e^{i\phi_3} |P_{r_3}^{\beta_3}\rangle). \quad (4.35)$$

Ou se as componentes $|P_{r_i}^{\beta_i}\rangle$, dos estados (4.34), não forem superposições dos mesmos estados do tipo produto direto. Por exemplo, para $N = 10$, $|P_{r_1}^{\beta_1}\rangle = P^{I,1} |47\rangle$ e $|P_{r_2}^{\beta_2}\rangle = P_{i=1}^{II,1} |93\rangle$, (2.26).

Uma vez estabelecidas as coincidências, a menos de um fator de escala, entre os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ não nulos desenvolvidos a partir de estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$ e dos estados especificados pelas restrições já mencionadas (4.34) — estados do tipo 1 (2.26) e eventualmente alguns, mas não todos, do tipo 2 (2.28), e cujas componentes $|P_{r_i}^{\beta_i}\rangle$ sejam todas superposições dos mesmos estados do tipo produto direto — ficam estabelecidas coincidências e não coincidências, a menos de um fator de escala, como especificado pela Tabela 4.1, entre tais modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ com aqueles desenvolvidos a partir do estado descrito pelo operador densidade dependente apenas da componente do spin $\rho_0(S^z)$, (3.36). Pode-se supor então que um estado definido pelo operador densidade $\rho_0(S^z)$ possa incluir misturas de estados definidos pelas superposições acima mencionadas, (4.34), e não apenas produtos diretos de auto-estados dos S_j^z , os quais foram mencionados na seção 4.2.2.

4.3.4 XXZ — gap, $|M_l\rangle$ e $|P_r^\beta\rangle$

Foi sondada, para a interação XXZ, a validade da conjectura enunciada na seção 3.2.3 a partir dos resultados da relaxação da magnetização gerada por Hamiltonianos da família XY, em sistemas unidimensionais de spin $\frac{1}{2}$, no limite de cadeias com infinitos sítios, a partir de estados iniciais descritos pelo operador densidade dependente de apenas uma componente do spin $\rho_0(S^\alpha)$, (3.12). Tal conjectura pressupõe que os sistemas unidimensionais, independentemente de qual seja o Hamiltoniano de troca de spin $\frac{1}{2}$, apresentarão relaxação da magnetização oscilatória e amortecida por uma lei de potência, e então prediz uma criticalidade na lei de potência para uma componente de Fourier particular da magnetização, caso o espectro de energia do Hamiltoniano apresente um *gap*.

Concluiu-se neste trabalho que não é verificada a universalidade da conjectura proposta. A conclusão não é definitiva, mas acredita-se que os indícios obtidos sejam bastante fortes. Esses aspectos serão apresentados nesta seção. O contra exemplo para a conjectura enunciada consiste na dinâmica gerada pelo Hamiltoniano XXZ no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z , a partir de estados caracterizados por muitas interfaces entre spins para cima e para baixo ou superposições desses estados. Exemplos serão mostrados adiante (4.37).

Devido aos efeitos de tamanho há uma dificuldade para a obtenção do comportamento da relaxação, quando a análise é feita em sistemas finitos, pois a relaxação ocorre indefinidamente apenas nos sistemas infinitos, seção 3.3.1, página 40. Na análise numérica feita para a dinâmica gerada pelo Hamiltoniano

XXZ, no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z , atingiram-se cadeias com até 14 sítios. São cadeias ainda pequenas, e há que se justificar porque as informações extraídas a partir delas serão atribuídas ao comportamento do sistema infinito e de sua relaxação. De fato não se poderiam atribuir, se o Hamiltoniano fosse o XY, para o qual em uma cadeia com 12 sítios, por exemplo, as componentes de Fourier da magnetização apresentam reconstruções quase totais de seus valores iniciais, Figura 3.4, o que exclui a tendência de relaxação. Para o Hamiltoniano XY a Figura 3.4 indica que uma cadeia com 60 sítios exibe a tendência de relaxação. As análises numéricas para a relaxação das cadeias XY finitas feitas através das correspondentes soluções analíticas, Capítulo 3, foram realizadas para cadeias com 1200 sítios e em tais análises emergiram as características do sistema infinito, a oscilação amortecida por uma lei de potência e a criticalidade. Essas características também emergiram em cadeias com 100 sítios. Tanto as cadeias com 1200 como as cadeias com 100 sítios são muito maiores que aquelas com 14.

Outra questão a ser ponderada é a necessidade de selecionarem-se estados iniciais que satisfaçam a condição de serem arbitrários. Foram escolhidos estados do tipo produto direto contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . Esses estados são descritos por superposições de muitos auto-estados do Hamiltoniano, e sob esse ponto de vista são bastante arbitrários.

O principal argumento para se acreditar que uma cadeia com 14 sítios seja suficientemente grande para extrair-se informações sobre a relaxação da magnetização — quando a dinâmica é gerada pelo Hamiltoniano XXZ e parte de um estado do tipo produto direto contido no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z — provém do fato de a dimensão desse subespaço crescer muito rapidamente com o número de sítios N , ($N \gg N/2$). Para $N = 14$, tal dimensão é 3432. Mais especificamente o argumento provém do fato de a dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução temporal dos estados arbitrários ser grande, comparável a ($N \gg N/2$). A Tabela 4.4 mostra as correspondentes dimensões quando se toma por estado inicial os estados analisados a seguir nesta seção.

Um aspecto a ser notado é que a dimensão do espaço de estados da versão fermiônica do Hamiltoniano XY é igual ao número de sítios N da cadeia. De maneira que o subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z em uma cadeia com 14 sítios tem dimensão maior que o espaço de estados da versão fermiônica do Hamiltoniano XY para uma cadeia com 1200 sítios.

Estados acessíveis

Os auto-estados acessíveis à evolução temporal de um certo estado são aqueles que compõem o estado dado,

$$|\psi_0\rangle = \sum_{r, \zeta} D_r^\zeta |r \zeta\rangle. \quad (4.36)$$

A Tabela 4.4 mostra, para alguns valores do parâmetro Δ , o número de auto-estados acessíveis às evoluções temporais dos estados a serem analisados nesta seção e na seção 4.6, (4.37) e (4.38), todos eles contidos no

Tabela 4.4: Dimensões de espaços de estados acessíveis a certos estados iniciais.

XXZ. $J^{(1)} = 1$. $N = 14$. Dimensão do subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , $(N N/2) = 3432$. Dimensão do subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z e pelas simetrias espaciais $\Gamma^{I,1}$ e $\Gamma_{i=1}^{II,1}$, $133 + 245 = 378$. O número de estados acessíveis é igual ao número de estados que compõem o estado dado (4.36), ou seja, o número de produtos escalares com módulo não nulo, $|\langle \psi_0 | r \zeta \rangle|$. Nesta Tabela foram contados aqueles módulos acima de 10^{-12} , o que coincide em quase todos os casos com a contagem de módulos acima de 10^{-8} . (a) $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$, (b) $\frac{1}{\sqrt{2}}(P^{I,1} + P_{i=1}^{II,1})|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$, (c) $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow_7\downarrow \dots \downarrow_{14}\rangle$, (d) $\frac{1}{\sqrt{2}}(P^{I,1} + P_{i=1}^{II,1})|\uparrow\uparrow \dots \uparrow_7\downarrow \dots \downarrow_{14}\rangle$.

Δ	1.5	1	0.5	0.1	0
(a)	3432	3423	3426	3432	2450
(b)	378	371	375	378	267
(c)	1694	1697	2551	1694	3205
(d)	212	212	307	212	378

subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . Nota-se que os estados do tipo produto direto analisados são superposições de todos os 3432 auto-estados do Hamiltoniano no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , ou de uma fração apreciável desses auto-estados. As superposições definidas pelos projetores $P^{I,1}$ e $P_{i=1}^{II,1}$ são superposições de até 378 auto-estados do Hamiltoniano definidos pelas simetrias espaciais $\Gamma^{I,1}$ e $\Gamma_{i=1}^{II,1}$.

Relaxação rápida

Se Δ (2.6) é não nulo, a relaxação é muito rápida para estados iniciais do tipo produto direto, os quais tenham muitas interfaces entre spins para cima e para baixo, e para superposições geradas pela aplicação de projetores do grupo de simetria espacial sobre tais estados do tipo produto direto com muitas interfaces, por exemplo,

$$|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \text{ e } \frac{1}{\sqrt{2}}(P^{I,1} + P_{i=1}^{II,1})|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle. \quad (4.37)$$

O contraste entre processos de relaxação rápida para $\Delta \neq 0$ e surgimento de reconstruções apreciáveis para $\Delta = 0$, em uma cadeia com 14 sítios, para os estados iniciais (4.37), pode ser nitidamente notado na Figura 4.6.

Os processos de relaxação rápida para $\Delta \neq 0$ e para estados iniciais como (4.37) excluem um requisito da conjectura mencionada no início desta seção: a relaxação da magnetização amortecida por uma lei de potência. Excluem também a conexão entre a existência de um *gap* no espectro de energia e

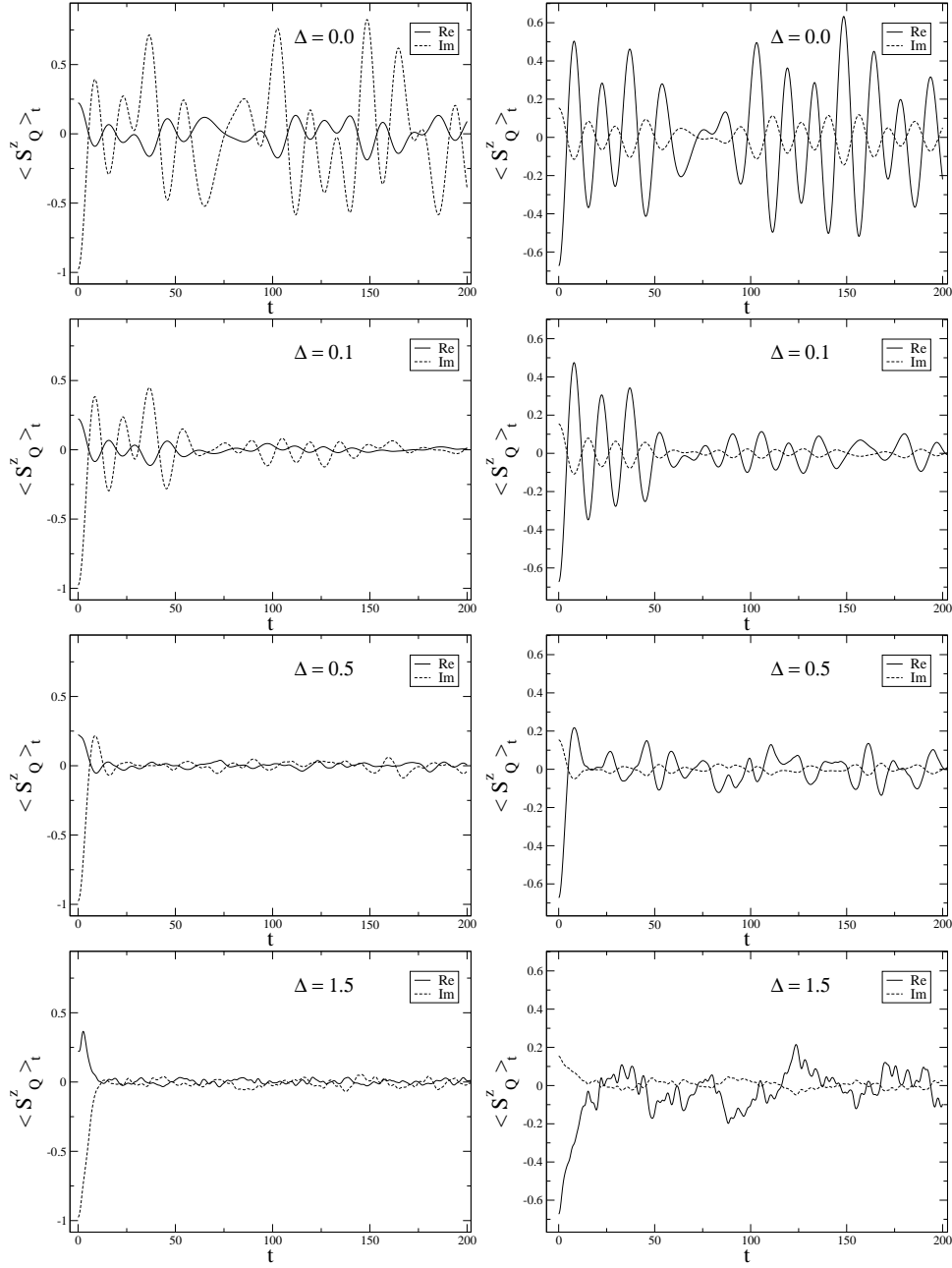


Figura 4.6: $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t]$ vs t e $\text{Im}[\langle S_Q^z \rangle_t]$ vs t . XXZ, $J^{(1)} = 1$, $N = 14$, $Q = \frac{1}{7}\pi$, $\Delta = 0, 0.1, 0.5, 1.5$. Estados iniciais (4.37): produto direto, coluna da esquerda, estado de superposição, coluna da direita. A relaxação é rápida para $\Delta > 0$, e não depende da presença do *gap*. Para $\Delta = 0$ as evoluções a partir dos dois estados iniciais diferem por mais que em fator de escala complexo. O estado de superposição aqui tratado é do tipo 2, seção 4.3.3. O tempo t está em unidades arbitrárias.

o surgimento de criticalidade na relaxação, uma vez que a condição de $\Delta \neq 0$ corresponde a regimes com e sem *gap* (2.7). Essas constatações constituem uma das conclusões mais importantes deste trabalho.

O segundo argumento para se acreditar que uma cadeia com 14 sítios seja suficientemente grande para a obtenção de informações sobre a relaxação da magnetização — quando a evolução de $\langle S_Q^z \rangle_t$ é gerada pelo Hamiltoniano XXZ, está contida no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z e tem por estado inicial estados dos tipos (4.37) — consiste no aumento extraordinário do número de parcelas da somatória de $\langle S_Q^z \rangle_t$, cujas exponenciais têm frequências distintas (4.29), quando $\Delta = 0$ é substituído por $\Delta \neq 0$. Os módulos das parcelas estão distribuídos em valores de diferentes ordens de grandeza. Com a finalidade de ilustração, a Tabela 4.5 mostra contagens de parcelas com os maiores módulos. No caso de $\Delta = 0$ todas parcelas têm módulos da mesma ordem de grandeza.

O fato de o número de frequências distintas para $\Delta \neq 0$ ser muito maior que o correspondente número para $\Delta = 0$ decorre da modificação da estrutura do espectro de energia. A Tabela 2.4 mostra as degenerescências no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z . No limite XX, $\Delta = 0$, as degenerescências são altas, enquanto que quando $\Delta \neq 0$ o Hamiltoniano XXZ apresenta quase sempre apenas singletos e dubletos. Fica estabelecida assim uma conclusão importante a qual associa a relaxação à estrutura do espectro de energia do Hamiltoniano na versão de spin: processos de relaxação rápida estão associados a baixas degenerescências, e processos de relaxação lenta a altas degenerescências. Isso será discutido novamente no Capítulo de Conclusões.

Finalmente, deve-se enfatizar que a partir dos resultados apresentados se constata que neste problema da relaxação em cadeias de spin isoladas do ambiente, para se obter o comportamento da evolução temporal da magnetização em sistemas com muitos graus de liberdade, quando a interação é dada pelo Hamiltoniano XXZ e o subespaço é aquele definido pelo autovalor nulo do operador S^z , é mais relevante que a dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução do estado inicial seja ‘grande’, e não necessariamente que o número de sítios da cadeia seja ‘grande’. A Tabela 4.4 indica que um número da ordem de *mil* já satisfaz a condição de ser *grande*.

***gap* e estados parede**

Quando há *gap* no espectro de energia do Hamiltoniano XXZ, no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , $\Delta > 1$, a relaxação é lenta para estados iniciais do tipo parede e para superposições geradas pela aplicação de projetores do grupo de simetria espacial sobre tais estados do tipo parede, por exemplo,

$$|\uparrow\uparrow \dots \uparrow_7\downarrow \dots \downarrow_{14}\rangle \text{ e } \frac{1}{\sqrt{2}} \left(P^{I,1} + P_{i=1}^{II,1} \right) |\uparrow\uparrow \dots \uparrow_7\downarrow \dots \downarrow_{14}\rangle. \quad (4.38)$$

A evolução de um dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ da magnetização a partir desses estados está mostrada na Figura 4.7, para diversos valores do parâmetro de anisotropia Δ . Na presença de *gap*, $\Delta = 1.5$, há processos mais lentos, os quais são caracterizados por não apresentarem oscilações ao redor de zero e por amortecimentos

Tabela 4.5: XXZ, $\Delta \neq 0$: Parcelas de maior peso na somatória (4.29).

$N = 14$, $Q = \frac{1}{7}\pi$. Cada subtabela corresponde respectivamente a $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ e a $\frac{1}{\sqrt{2}}(P^{I,1} + P_{i=1}^{II,1})|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$. Para cada Δ , está exibido o número de parcelas de (4.29) cujas amplitudes $B_l^{(z,Q,\psi_0)}$, (4.30), têm módulos acima de uma certa fração da amplitude de maior módulo. $|B_l^{(z,Q,\psi_0)}| > fr |B_l^{(z,Q,\psi_0)}|_{\max}$. Parcelas cujos módulos são pequenos não foram contadas. Para $\Delta = 0$ o número total de parcelas é de apenas 8 e 4 para cada estado inicial, respectivamente.

Δ	0.1		0.5		1.0		1.5	
	#	fr	#	fr	#	fr	#	fr
	7	0.738	9	0.734	15	0.734	10	0.731
	182	0.401	116	0.396	130	0.395	109	0.390
	1086	0.161	757	0.157	713	0.156	446	0.152
	3922	0.048	3481	0.046	3410	0.045	2185	0.043
	7	0.715	8	0.712	5	0.709	3	0.705
	39	0.365	24	0.361	16	0.357	14	0.351
	113	0.133	87	0.131	88	0.127	45	0.123
	360	0.035	367	0.034	288	0.032	207	0.030

que não são da forma de uma lei de potência (3.28). Em contraste com a criticalidade presente na família XY, descrita por um salto do expoente da potência como indicado na Figura 3.2, quanto maior o parâmetro de anisotropia Δ , mais lenta é a relaxação.

Para $\Delta = 0.5$ há extinção rápida da magnetização, mas com a presença de pequenas reconstruções parciais. Para $\Delta = 1$ há oscilações que não são extinguidas. Esse caso corresponde a uma transição entre os regimes de extinção e de relaxação lenta.

O processo lento pode ser entendido a partir da combinação de dois fatores. No caso do Hamiltoniano XXZ, os giros do spin, *spin flips*, são promovidos pelos termos associados às componentes transversais da troca, $S_i^+ S_{i+1}^-$ e $S_i^- S_{i+1}^+$, os quais promovem giros de pares de spins vizinhos antiparalelos, $\uparrow\downarrow \leftrightarrow \downarrow\uparrow$. Inicialmente, apenas os sítios das interfaces $\uparrow\uparrow$ e $\uparrow\downarrow$ sofrem ação do Hamiltoniano. Em segundo lugar, quando a interação da componente longitudinal do spin $S_i^z S_{i+1}^z$ é mais intensa do que as componentes transversais, $\Delta > 1$, o que corresponde ao surgimento do *gap*, os spins anti-alinhados das interfaces $\uparrow\uparrow$ e $\uparrow\downarrow$ tornam-se mais estáveis, e o giro do spin é menos favorável. Quanto maior o *gap*, ou o Δ , mais o Hamiltoniano aproxima-se do limite Ising. O Hamiltoniano XXZ (2.1) tende ao limite Ising a medida que Δ aumenta, $\Delta \rightarrow \infty$, e $\xi_x = \xi_y$ permanecem finitos, ou então, atinge o limite Ising se Δ for finito e $\xi_x = \xi_y = 0$. No limite Ising a dinâmica desaparece porque o Hamiltoniano envolve apenas uma componente do spin e não há flutuações quânticas.

A natureza do estado inicial e os acoplamentos gerados pelo Hamiltoniano são importantes para a relaxação. A diferença entre as formas das evoluções da magnetização dos estados com muitas interfaces e os estados do tipo parede, para $\Delta > 1$, não é tão notável para o Hamiltoniano XYZ como é para o XXZ. O Hamiltoniano XYZ também acopla estados através dos giros de pares de spins vizinhos paralelos, $\uparrow\uparrow \leftrightarrow \downarrow\downarrow$, além dos giros de pares de spins vizinhos antiparalelos. A Figura 4.8 ilustra as evoluções de um modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ para estados dos dois tipos em uma cadeia com 10 sítios, para o Hamiltoniano XYZ. Ambas evoluções estão contidas em um subespaço cuja dimensão é $2^{N-1} = 512$.

Como já havia sido visto, Figura 4.1 (a), para o Hamiltoniano planar XY(γ), o modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ para $Q = 1 \frac{2\pi}{N}$ referente ao estado $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$ não exibe tendência de relaxação — a Tabela 4.2 indica que ambos estados $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$ e $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$ desenvolvem, a menos de um fator de escala, a mesma evolução de cada $\langle S_Q^z \rangle_t$ para o Hamiltoniano XY(γ). A presença de reconstruções apreciáveis também é manifestada para o Hamiltoniano planar XX, Figuras 4.6 e 4.7 para $\Delta = 0$.

4.4 XXZ — uma onda

Os estados de uma onda de spin são aqueles definidos pela expressão (2.39). Tais estados caracterizam um subespaço de uma onda. A base de estados do tipo produto direto para esse subespaço é formada por estados com $N - 1$ spins apontando em uma direção e *um* spin na direção oposta (2.42). Há dois subespaços de uma onda de spin. Em ambas evoluções da magnetização são equivalentes quando não há

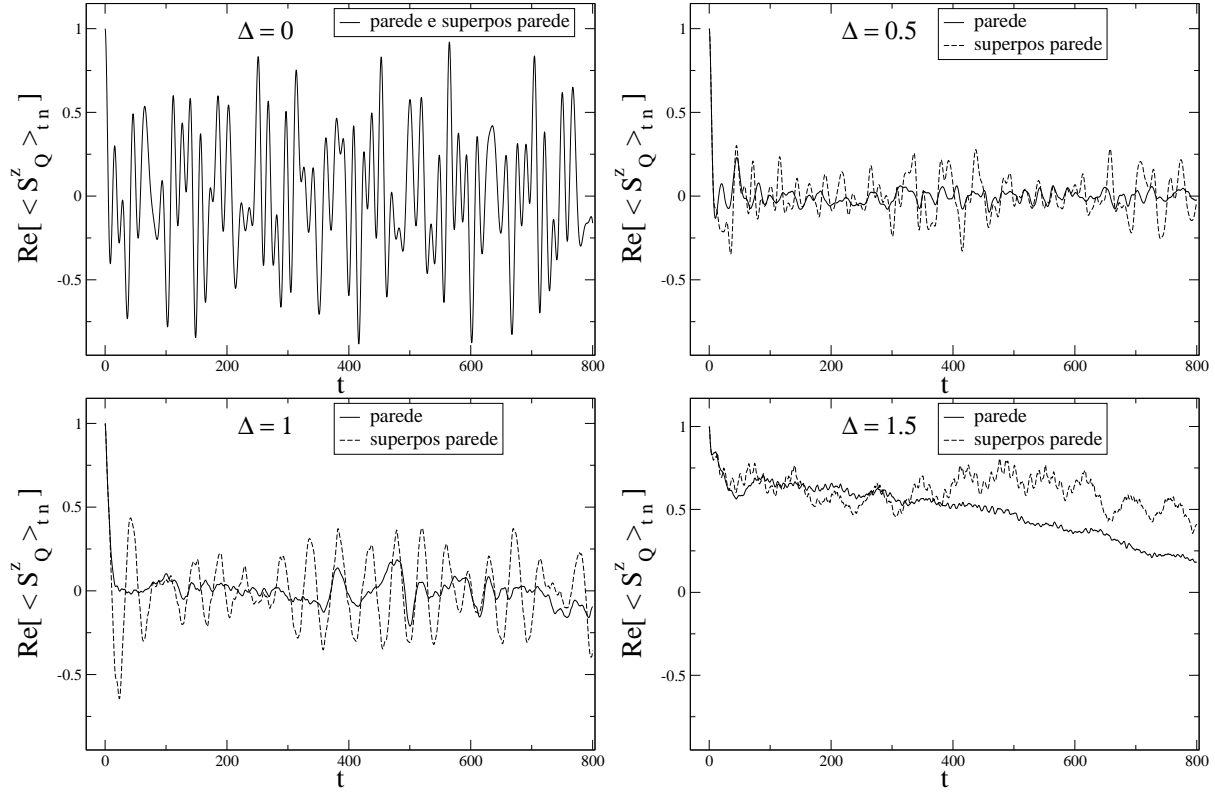


Figura 4.7: $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t , XXZ, $J^{(1)} = 1$. $N = 14$, $Q = \frac{1}{7}\pi$, $\Delta = 0, 0.5, 1.0, 1.5$. Dois estados iniciais: um do tipo parede $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow_7\downarrow\downarrow \dots \downarrow_{14}\rangle$ e o outro é uma superposição de estados do tipo parede, (4.38). Para ambos estados iniciais a relaxação é rápida para $0 < \Delta \leq 1$ e lenta para $\Delta > 1$. Para esses estados iniciais as partes real e imaginária de $\langle S_Q^z \rangle_t$ são proporcionais. O tempo t está em unidades arbitrárias.

campos externos. Será utilizada a expressão *subespaço de uma onda*, a qual fará referência indistintamente a qualquer um dos dois subespaços. As ondas de spin são auto-estados do Hamiltoniano XXZ, por isso suas magnetizações apresentam evoluções triviais, e não são de interesse neste tabalho. Aqui simplesmente tomou-se o nome das ondas de spin para a designação do subespaço cujo autovalor do operador S^z é $\frac{N}{2} - 1$.

No caso do Hamiltoniano XXZ as evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ no subespaço de uma onda estão desacopladas das evoluções nos demais subespaços, (4.7). Os modos transversais $\langle S_Q^x \rangle_t$ e $\langle S_Q^y \rangle_t$ são identicamente nulos se se restringe a dinâmica ao subespaço de uma onda. Eles foram calculados a partir de estados iniciais dados pela superposição de um estado contido no subespaço de uma onda de spin com o estado ferromagnético.

O Hamiltoniano XXZ analisado inclui interações entre primeiros vizinhos com e sem impurezas, e interações entre segundos vizinhos sem impurezas (2.37). Os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ no subespaço de uma onda de

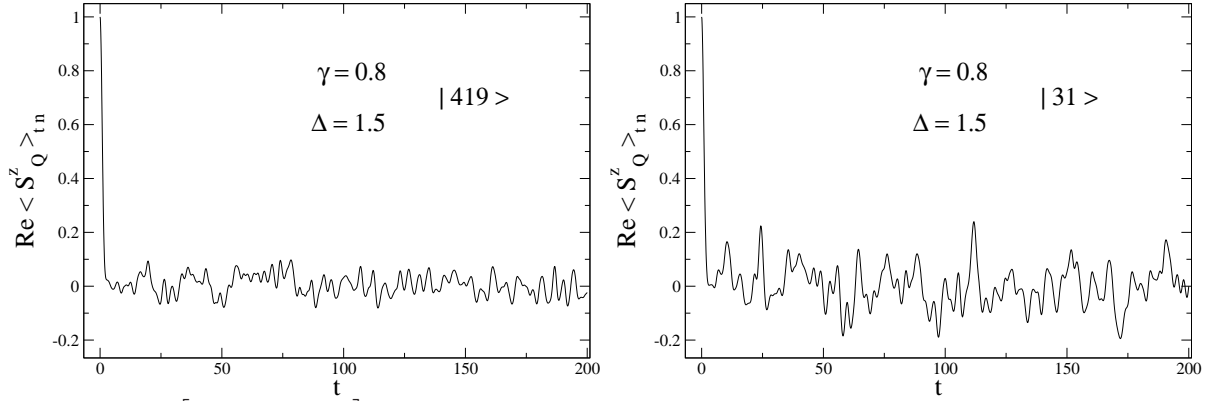


Figura 4.8: $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t . XYZ, $\xi_x = 1 + \gamma$, $\xi_y = 1 - \gamma$, $\xi_z = \Delta$, $\gamma = 0.8$, $\Delta = 1.5$. $N = 10$, $Q = 1 \frac{2\pi}{N}$. O tempo t está em unidades arbitrárias. Estados iniciais: (a) $|419\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$. (b) $|31\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$.

spin foram calculados através de diagonalização direta (4.2). Todas as variantes do Hamiltoniano foram implementadas em um único programa de cálculo. Foi possível realizar os cálculos em cadeias com até 3360 sítios, porém as cadeias com 1200 sítios são grandes o bastante. O algoritmo implementado difere do algoritmo para o subespaço do autovalor nulo de S^z em detalhes secundários referentes a alocação apropriada de memória computacional, como a definição das dimensões das matrizes do algoritmo e a identificação dos estados da base.

Os estados iniciais escolhidos foram o produto direto com apenas um spin girado $|l\rangle$, e superposições desse tipo de estados, incluindo os estados $|W_N\rangle$,

$$|l\rangle = |\uparrow\uparrow \cdots \uparrow (l:\downarrow) \uparrow \cdots \uparrow\rangle, \quad (4.39)$$

$$|W_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} (e^{i\theta_1} |\downarrow\uparrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle + e^{i\theta_2} |\uparrow\downarrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle + \cdots + e^{i\theta_N} |\uparrow\uparrow \cdots \downarrow\rangle), \quad (4.40)$$

onde as fases θ_l , $l = 1, 2, \dots, N$ são reais e arbitrárias. E também os estados,

$$|\text{Pa}_N^L\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l=1}^L |l\rangle, \quad (4.41)$$

$$|\text{Pe}_N^L\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l=0}^{L-1} \left| 1 + l \frac{N}{L} \right\rangle. \quad (4.42)$$

Para o estado $|\text{Pe}_N^L\rangle$ tomou-se L divisor de N . Deve-se enfatizar que o estado $|\text{Pa}_N^L\rangle$ não corresponde a um estado do tipo parede $|\uparrow\uparrow \cdots \uparrow_L \downarrow \downarrow \cdots \downarrow_N\rangle$.

Quando não há impurezas, o Hamiltoniano XXZ gera a mesma evolução da magnetização que o Hamiltoniano planar isotrópico XX, para a evolução temporal dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ no subespaço de uma onda de spin, quer haja ou não interações entre segundos vizinhos. Tal independência de $\langle S_Q^z \rangle_t$ em

relação ao parâmetro de anisotropia Δ decorre das seguintes características: no subespaço de uma onda de spin os auto-estados são independentes de Δ , e todos os autovalores sofrem o mesmo incremento ao se variar Δ . Na base dos estados do tipo produto direto do subespaço de uma onda verifica-se,

$$\Delta \sum_{i=1}^N \left(J^{(1)} S_i^z S_{i+1}^z + J^{(2)} S_i^z S_{i+2}^z \right) |l\rangle = \Delta \left(\frac{N}{4} - 1 \right) \left(J^{(1)} + J^{(2)} \right) |l\rangle = cte |l\rangle, \quad (4.43)$$

a qual é válida para todo $|l\rangle$ quando há condições de contorno periódicas. Decorre então,

$$\mathcal{H}_{XXZ}^{\text{onda}} = \mathcal{H}_{XX}^{\text{onda}} + cte, \quad E_{XXZ}^{\text{onda}}(\zeta) = E_{XX}^{\text{onda}}(\zeta) + cte \quad \forall \zeta. \quad (4.44)$$

A independência dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ em relação à componente z da interação de troca fica evidente a partir de (4.44) e da expressão (4.3), onde as amplitudes $A_{\zeta\zeta'}^{(\alpha, Q, \psi_0)}$ dependem dos auto-estados, e as frequências $\omega_{\zeta\zeta'}$ das diferenças entre as energias.

4.4.1 uma onda sem impurezas e sem interações entre segundos vizinhos

Nesta seção serão analisadas evoluções temporais a partir de diversos estados iniciais. A partir de alguns estados iniciais, $|l\rangle$ (4.39) e $|\text{Pa}_N^L\rangle$ (4.41), verificou-se relaxação oscilatória e amortecida por uma lei de potência, sem a criticalidade indicando relaxação mais lenta. Em particular, a partir dos estados $|l\rangle$, a relaxação é semelhante à evolução descrita pela solução analítica (3.36), quando o estado inicial é descrito pelo operador densidade dependente apenas da componente z do operador de spin $\rho_0(S^z)$. A ausência de criticalidade especificando relaxação mais lenta é justificada porque não há um parâmetro no Hamiltoniano a ser ajustado, nem *gap* e nem *nesting*. Por outro lado, a partir de estados dos tipos $|W_N\rangle$ (4.40) e $|\text{Pe}_N^L\rangle$ (4.42) verificaram-se comportamentos distintos daquela relaxação.

Para o Hamiltoniano planar XX, sem impurezas e sem interações entre segundos vizinhos, o subespaço de uma onda de spin está associado ao Hamiltoniano fermiônico CC , Tabela 3.1, para qualquer N par. Constatou-se que a evolução de $\langle S_Q^z \rangle_t$ a partir de um estado do tipo produto direto (4.39) calculada numericamente (4.2), coincide ou não coincide com a evolução a partir do estado inicial $\rho_0(S^z)$ calculada analiticamente (3.36), se q for respectivamente par ou ímpar, onde $Q = q \frac{2\pi}{N}$, conforme já havia sido notado, Tabela 4.1, e não depende do número par de sítios N ser ou não ser múltiplo de quatro, Figura 4.9.

Uma característica a ser notada é que no caso de haver não coincidência entre as duas soluções, quando q é ímpar, a não coincidência manifesta-se apenas a partir da primeira reconstrução parcial. Até então as duas evoluções procedem-se da mesma maneira.

Para a dinâmica a partir de um estado do tipo produto direto, constatou-se que a expressão da solução numérica de $\langle S_Q^z \rangle_t$ (4.4) apresenta todas ou quase todas amplitudes $B_l^{(z, Q, \psi_0)}$ (4.5) iguais entre si, para cada conjunto de z , Q e $|\psi_0\rangle = |1\rangle$, (4.39), Tabela 4.6. A evolução temporal de $\langle S_Q^z \rangle_t$ a partir de outros estados iniciais, definidos por superposições, é distinta da evolução a partir de um estado do tipo produto

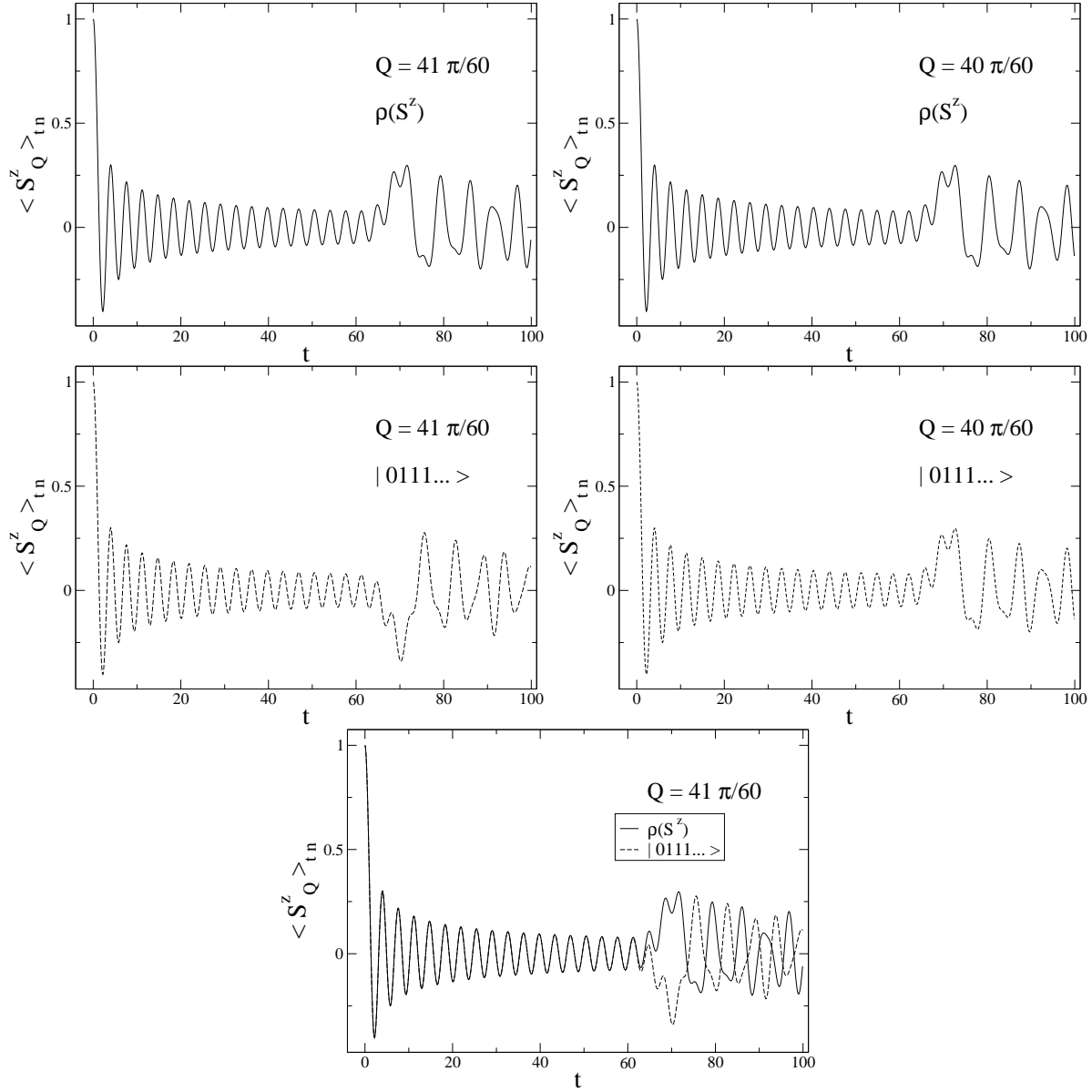


Figura 4.9: $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t . $N = 120$. Hamiltoniano XX, $\Delta = 0$. Subespaço de uma onda de spin. Estados iniciais, $\rho_0(S^z)$ e $|1\rangle$, (4.39). $Q = q \frac{2\pi}{N}$. $q = 41$: coincidência até a primeira reconstrução parcial. $q = 40$: coincidência para todo t . As funções associadas a $\rho_0(S^z)$ e a ambos números de onda analisados são muito parecidas, diferem apenas por um fator de escala no eixo do tempo. O tempo t está em unidades arbitrárias.

direto. As amplitudes $B_l^{(\alpha, Q, \psi_0)}$ não são simples como na Tabela 4.6, apresentam valores distintos para cada índice l .

Tabela 4.6: Amplitudes $\langle S_Q^z \rangle_t$, $|\psi_0\rangle$: Produto Direto.

$N = 120,$	$Q = q \frac{2\pi}{N},$	$b = B_l^{(z, Q, 1\rangle)},$	
$q \backslash \omega_l^{(z, Q, 1\rangle)}$	0	ω_{interm}	ω_{max}
ímpar	—	b	b
par $\neq 60$	$2b$	b	b
60	b	b	$\frac{1}{2}b$

para N=120 há cerca de 60 frequências intermediárias entre 0 e ω_{max}

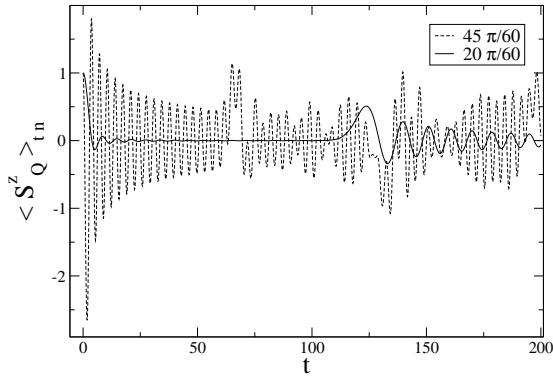


Figura 4.10: $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t . XX, $J^{(1)} = 1$, $N = 120$, $|\text{Pa}_{120}^3\rangle$. Relaxação rápida para $Q = \frac{1}{3}\pi$ e usual para $Q = \frac{3}{4}\pi$. O tempo t está em unidades arbitrárias.

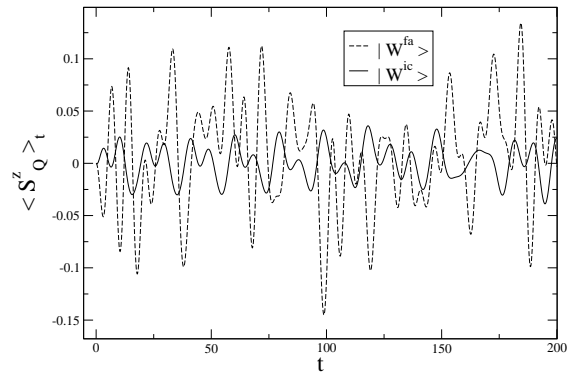


Figura 4.11: $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t . XX, $J^{(1)} = 1$. $N = 120$. $Q = \frac{\pi}{3}$. $|W_N^{fa}\rangle$ e $|W_N^{ic}\rangle$ flutuam. O tempo t está em unidades arbitrárias.

Relaxação, Flutuações e evoluções a partir de Auto-estados

Para certos tipos de estado inicial o sistema desenvolve uma tendência de relaxação desde o instante inicial. Tal tendência é interrompida pela primeira reconstrução parcial. Essa relaxação é caracterizada por uma envolvente do tipo lei de potência, como no caso da relaxação a partir de um produto direto. O expoente ν da lei de potência (3.43) pode depender do número de onda Q e do estado inicial, por exemplo,

$$\begin{aligned}
 &|1\rangle, \quad \forall Q, \nu = 0.5, \\
 &|\text{Pa}_{120}^3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle), \quad Q = \begin{cases} \frac{\pi}{3}, \nu = 1.5, \\ \text{demais valores}, \nu = 0.5, \end{cases} \quad (4.45)
 \end{aligned}$$

onde os estados $|l\rangle$ são dados por (4.39).

No caso do estado de superposição $|\text{Pa}_{120}^3\rangle$, a mudança do expoente $\frac{1}{2}$ associado a quase todos os Q para $\frac{3}{2}$ associado à vizinhança de um Q particular, $Q = \frac{\pi}{3}$, não indica a criticalidade de interesse neste trabalho associada a um modo de relaxação mais lenta, ao contrário, tal modo relaxa mais rapidamente

que os demais, Figura 4.10.

Em contraste com a relaxação que leva o sistema de um estado caracterizado por magnetização não homogênea para estados homogêneos, há processos onde o sistema parte de um estado, que não seja auto-estado, caracterizado por magnetização homogênea: nesse caso a evolução de cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ flutua exibindo um comportamento errático, com amplitudes comparáveis às amplitudes desenvolvidas a partir do estado do tipo produto direto, no momento da primeira reconstrução parcial. Esse é o caso de estados iniciais como por exemplo $|W_N^{fa}\rangle$ e $|W_N^{ic}\rangle$, (4.40), caracterizados respectivamente por fases θ_l reais e aleatórias e por fases $\theta_l = 2\pi l\beta/N$ com β irracional. Foram selecionados arbitrariamente um estado particular de cada um dos tipos $|W_N^{fa}\rangle$ e $|W_N^{ic}\rangle$, sendo que para esse último tomou-se $\beta = \sqrt{2}$. Os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$, com $Q \neq 0$, desenvolvidos a partir desses dois estados flutuam, a Figura 4.11 mostra os comportamentos típicos. Entende-se que para esses estados, o sistema já esteja inicialmente relaxado. As flutuações decorrem do fato de o sistema ser finito.

A evolução trivial a partir de um auto-estado é diferente das evoluções semelhantes à relaxação e à flutuação. Nesse caso todas os valores médios da magnetização são independentes do tempo. Entretanto, há que se discernir dois casos particulares. Devido às degenerescências do espectro, uma vez que quase todos os níveis são dubletos, há infinitas escolhas possíveis da base de auto-estados. Uma possível escolha para a base de auto-estados são os estados $|W_N^m\rangle$ (4.40) caracterizados por fases $\theta_l = 2\pi lm/N$, com $m = 0, 1, \dots, N-1$. São equivalentes aos estados (2.39). Para esses estados verifica-se,

$$\langle S_Q^z \rangle_t = \begin{cases} cte \neq 0, & Q = 0, \\ 0, & Q \neq 0. \end{cases} \quad (4.46)$$

Por outro lado, todos os auto-estados podem ser escritos exclusivamente com coeficientes reais. Nessa nova base cada auto-estado de um dubleto pode ser expresso pela combinação de dois auto-estados degenerados $|W_N^m\rangle$ e $|W_N^{-m}\rangle$. Surgem dois modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ não nulos além do modo homogêneo,

$$\langle S_Q^z \rangle_t = \begin{cases} cte \neq 0, & Q = 0, \frac{2\pi}{N}m, \frac{2\pi}{N}(N-m), \\ 0, & \text{demais valores de } Q. \end{cases} \quad (4.47)$$

Note que a modulação espacial da magnetização desse último caso não corresponde à onda estacionária apresentada na Figura 4.5, a qual apresenta uma evolução temporal e é originada de um estado que não é um auto-estado.

Foram analisadas ainda as evoluções a partir de estados como $|\text{Pa}_N^L\rangle$ (4.41) e $|\text{Pe}_N^L\rangle$ (4.42), para $N = 120$ e $L = 12$. Ambos não apresentam magnetização espacialmente homogênea, enquanto os estados $|W_N\rangle$ apresentam. A evolução de um modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ a partir do estado $|\text{Pa}_{120}^{12}\rangle$, Figura 4.12, assemelha-se qualitativamente à evolução a partir de um estado do tipo produto direto ou da superposição $|\text{Pa}_{120}^3\rangle$. O estado $|\text{Pe}_{120}^{12}\rangle$ desenvolve evoluções, Figura 4.13, não nulas da magnetização somente para as modulações dadas por $Q = 2\pi l \frac{L}{N}$, com $l = 1, \dots, \frac{N}{L}$, as quais apresentam reconstruções quase totais da magnetização.

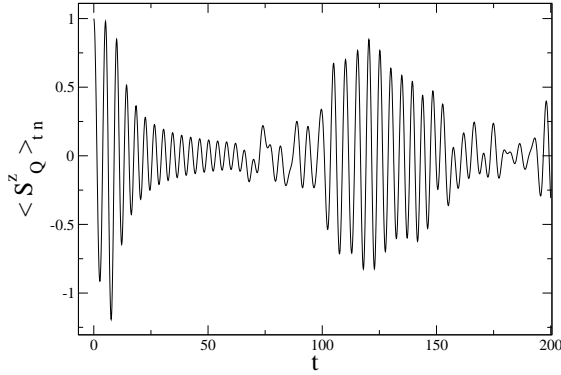


Figura 4.12: $\text{Re}(\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0)$ vs t , XX, $J^{(1)} = 1$. $N = 120$. $Q = \frac{3}{5}\pi$. $|\text{Pa}_{120}^{12}\rangle$. O tempo t está em unidades arbitrárias.

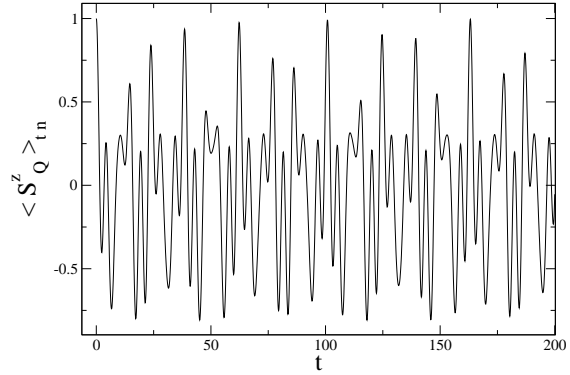


Figura 4.13: $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t , XX, $J^{(1)} = 1$. $N = 120$. $Q = \frac{3}{5}\pi$. $|\text{Pe}_{120}^{12}\rangle$. Há reconstruções quase totais de $\langle S_Q^z \rangle_t$. O pico mais alto exibido nesta Figura, em $t = 163.17$, atinge o valor de 0.9964 ao invés de 1.0. O tempo t está em unidades arbitrárias.

Modos transversais

Para que a evolução temporal de um modo transversal $\langle S_Q^x \rangle_t$ ou $\langle S_Q^y \rangle_t$ seja não nula, o estado inicial precisa envolver pelo menos dois estados cujos autovalores de S^z difiram por uma unidade. Essa condição é satisfeita por uma superposição do estado ferromagnético $|F\rangle = |\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle$ e de um estado contido no subespaço de uma onda. Se a componente do estado inicial no subespaço de uma onda for por exemplo um produto direto $|l\rangle$ ou o estado $|\text{Pa}_N^3\rangle$, as partes real e imaginária de $\langle S_Q^x \rangle_t$ e $\langle S_Q^y \rangle_t$ serão proporcionais. Se tal componente é um estado $|W_N\rangle$, que não seja auto-estado do Hamiltoniano, as partes real e imaginária não serão proporcionais.

A evolução temporal de um modo transversal $\langle S_Q^x \rangle_t$ ou $\langle S_Q^y \rangle_t$, a partir de uma superposição do estado $|F\rangle$ com um $|l\rangle$, é periódica, reversível, apresentando uma frequência de Rabi. As evoluções dos modos transversais $\langle S_Q^x \rangle_t$ e $\langle S_Q^y \rangle_t$ dependem de Δ , porque a mudança da energia do estado ferromagnético com Δ é diferente da mudança das energias dos auto-estados do subespaço de uma onda.

4.4.2 uma onda com interações entre segundos vizinhos

Como já foi mencionado no início da seção 4.4, as evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ no subespaço de uma onda de spin, com Hamiltoniano envolvendo interações entre primeiros e segundos vizinhos, independem da componente z da interação de troca. Ao incluírem-se interações entre segundos vizinhos com intensidade acima de certo limite, emergem modos críticos na relaxação da magnetização desse sistema a partir do estado inicial do tipo produto direto. Essa criticalidade é análoga àquela do tipo (A) encontrada no

Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$, seção 3.4.

O Hamiltoniano com interações entre segundos vizinhos é não integrável. A lei de potência e a criticalidade encontradas nesse sistema *podem* indicar que tais características prescindam da condição de integrabilidade presente nos estudos anteriores [2, 3, 4]. Entretanto, pode ser que não necessariamente indique, pelo fato de haver soluções analíticas no subespaço de uma onda (2.39) e (2.40). Um palpite arriscado consiste em se imaginar uma analogia com um sistema caótico, o qual preserva regularidade em uma parte do espaço de estados e é irregular em outra parte. De maneira que a existência de soluções analíticas exatas no subespaço de uma onda de spin de um sistema não integrável, pode implicar que uma possível irregularidade associada a não integrabilidade não se manifesta nesse subespaço.

Não há *gap* no espectro de energia da banda de uma onda de spin. Porém surge *nesting* nessa curva de dispersão (2.40), quando nela surgem dois vales, Figura 4.14. A existência dos vales depende da derivada primeira da curva de dispersão anular-se,

$$\left. \frac{\partial E_k^{(1,2)}}{\partial k} \right|_{k=k_0} = 0, \text{ para algum } k_0. \quad (4.48)$$

Tal condição é satisfeita quando,

$$|J^{(2)}| > J_{nest}^{(2)} = \frac{1}{4}, \quad (4.49)$$

de maneira que o *nesting* está ausente no Hamiltoniano sem interações entre segundos vizinhos. As curvas de dispersão da Figura 4.14 assemelham-se às correspondentes curvas do modelo $XY(h, \gamma)$, as quais apresentam ou não os vales dependendo dos valores dos parâmetros h e γ , Figura 3.22.

A evolução dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ a partir de um estado do tipo produto direto (4.39) não depende do sinal da interação entre segundos vizinhos, depende apenas do módulo $|J^{(2)}|$. Tal independência com o sinal de $J^{(2)}$ não ocorre quando a dinâmica começa a partir de outros estados iniciais, como por exemplo, $|\text{Pa}_N^L\rangle$, $|\text{Pe}_N^L\rangle$, $|W_N^{fa}\rangle$ e $|W_N^{ic}\rangle$. Assim como no caso da ausência de interação entre segundos vizinhos, há uma forte dependência dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ com o estado inicial. As duas situações de dependência e independência com o sinal de $J^{(2)}$ não têm relação com a discussão feita na seção 4.1.2. Naquela seção a mudança do sinal de $J^{(1)}$ corresponde à mudança do sinal do Hamiltoniano, enquanto nesta seção a mudança do sinal de $J^{(2)}$ não corresponde. Dado que a interação entre primeiros vizinhos foi escolhida como sendo $J^{(1)} = 1$, antiferromagnética, se a interação entre segundos vizinhos for ferromagnética, $J^{(2)} < 0$, não haverá frustração no alinhamento dos spins da cadeia, porém se for antiferromagnética, $J^{(2)} > 0$, haverá frustração. Resta ser entendido por que a presença ou não de frustração não faz diferença para a evolução a partir do estado do tipo produto direto.

Os resultados apresentados nesta seção referem-se à evolução de $\langle S_Q^z \rangle_t$ a partir do estado inicial do tipo produto direto. Além da solução numérica obteve-se uma solução analítica para esse caso,

$$\langle S_Q^z \rangle_t = \frac{N}{2} \delta_{Q,0} - \frac{1}{N} e^{iQ\lambda} \sum_{k=\frac{2\pi}{N}}^{2\pi} e^{i(E_{k+Q}^{(1,2)} - E_k^{(1,2)})t}, \quad (4.50)$$

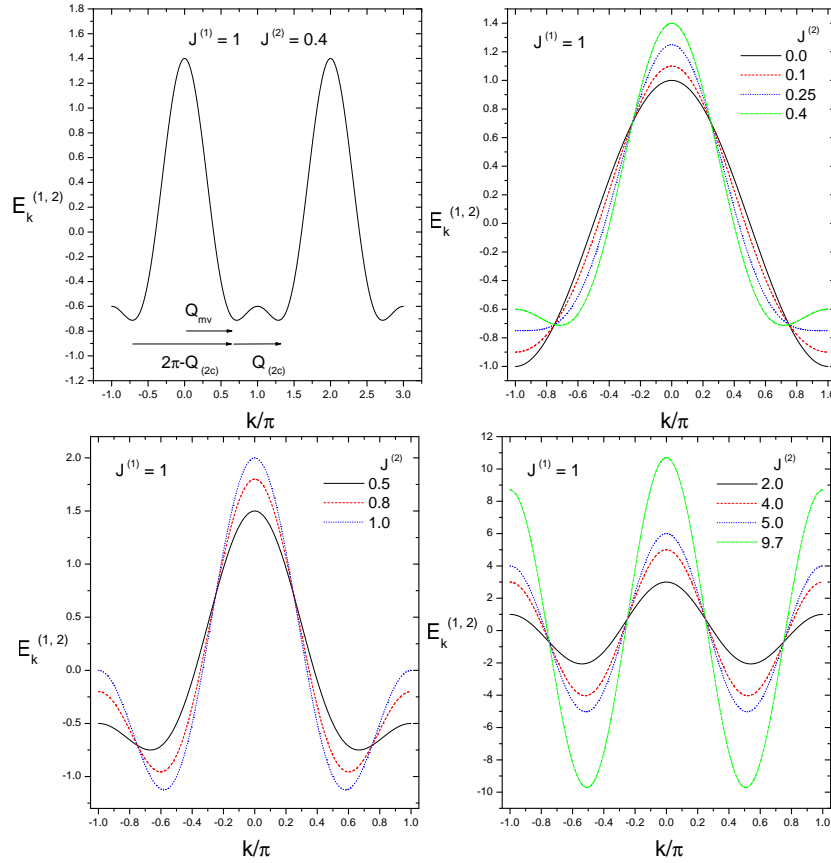


Figura 4.14: Curva de Dispersão $E_k^{(1,2)}$ vs k , (2.40). $N = 1200$. $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0, 0.1, 0.25, 0.4, 0.5, 0.8, 1.0, 2.0, 4.0, 5.0, 9.7$. $J^{(2)}$ altera os autovalores, enquanto deixa os auto-estados invariantes. O surgimento do *nesting* provém de um reordenamento de parte dos níveis de energia, quando $|J^{(2)}| > J_{nest}^{(2)}$. Cada uma dessas curvas não é contínua, é uma sequência discreta de N pontos. Esta Figura apresenta analogias com a Figura 3.22.

onde as energias $E_k^{(1,2)}$ são dadas pela relação de dispersão (2.40) e λ indica o estado inicial $|\lambda\rangle$, (4.39). A compatibilidade entre os cálculos numérico (4.2) e analítico (4.50) foi verificada.

Criticalidade e o Patamar de Oscilação

A ocorrência de criticalidade originada pelas interações entre segundos vizinhos no subespaço de uma onda de spin, a partir de estados do tipo produto direto (4.39), apresenta muitas analogias com a criticalidade do tipo (A) do Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$, seção 3.4. Tal criticalidade emerge quando há *nesting* (4.49), neste caso o *nesting* decorre de dois vales na curva de dispersão, os quais surgem simetricamente em relação ao ponto de $k = 0$, Figura 4.14. A criticalidade não emerge quando não surgem esses vales.

Tabela 4.7: $XX(J^{(2)})$: Mínimos Q_{mv} da curva de dispersão e Criticalidades $Q_{(2c)}$. $N = 1200$.

$J^{(1)} = 1$. $2Q_{\text{mv}}$ corresponde a $2\pi - Q_{(2c)}$ e $2\pi - 2Q_{\text{mv}}$ a $Q_{(2c)}$. Os números de onda estão expressos em unidades de $\frac{2\pi}{1200}$. Os números de onda Q_{mv} foram determinados por meio das curvas de dispersão como indicado na Figura 4.14. Os números de onda críticos $Q_{(2c)} = Q_{(2c)}(J^{(2)})$ foram determinados para cada $J^{(2)}$ comparando-se modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ de uma amostragem de números de onda Q . Os valores críticos $Q_{(2c)}$ são definidos por modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ que no momento da primeira reconstrução parcial da magnetização apresentam o maior patamar de oscilação. Por exemplo, a Figura 4.17 mostra o caso de $J^{(2)} = 0.4$. Trata-se de um critério visual. O retângulo indica a criticalidade analisada em pormenores através de ajustes definidos por uma lei de potência, Figura 4.18. A curva $Q_{(2c)}$ vs $1/J_c^{(2)}$ está mostrada na Figura 4.15. Esta Tabela apresenta analogias com a Tabela 3.3.

† Para $J^{(2)}$ grandes a criticalidade torna-se muito sensível com o valor de Q , o qual é uma variável discreta no sistema finito. Para $J^{(2)} = 10.0$, $Q_{(2c)}$ deveria estar entre 590 e 591. Por outro lado, quanto mais $J^{(2)}$ aproxima-se de $J_{\text{nest}}^{(2)}$ superiormente, $J^{(2)} > J_{\text{nest}}^{(2)}$, maior é a incerteza para discernir-se $Q_{(2c)}$.

$J_c^{(2)}$	0.27	0.28	0.3	0.4	0.5	0.8	1.0	2.0	4.0	5.0	9.7†
Q_{mv}	526	511	488	429	400	361	348	324	312	310	305
$Q_{(2c)}$	129	164	214	337	396	476	502	551	576	581	590

A localização dos mínimos dos vales depende de $J^{(2)}$.

De maneira distinta ao que ocorre no Hamiltoniano XY(h, γ), tanto em situações onde surgem os vales como na ausência deles, *não* há presença de *gap* nas curvas de dispersão (2.40). O *gap* não é a característica relevante para essa criticalidade.

As seguintes considerações expostas na seção 3.4.1 aplicam-se a esta discussão sobre a criticalidade originada pelas interações entre segundos vizinhos. Os modos críticos oscilam ao redor de um patamar não nulo, a partir do início da relaxação. O patamar de oscilação diminui com o tempo e finalmente tende a zero no limite de cadeias grandes, a fim de que a condição de homogeneidade para o estado de equilíbrio seja satisfeita. O patamar decorre de parcelas de $\langle S_Q^z \rangle_t$ de baixas frequências, as quais são diferenças entre energias próximas, associadas a pares de auto-estados, onde um auto-estado está situado em um dos vales da curva de dispersão, e o outro auto-estado no outro vale. A diferença de momento entre os mínimos dos dois vales, $2Q_{\text{mv}}$ ou $2\pi - 2Q_{\text{mv}}$, Figura 4.14, define o número de onda crítico $2\pi - Q_{(2c)}$ ou $Q_{(2c)}$. Há uma alta ‘densidade’ de parcelas na expressão de $\langle S_Q^z \rangle_t$ associadas às baixas frequências. Essa alta ‘densidade’ é uma marca no sistema finito da existência de *nesting* no sistema infinito. Há notável coincidência entre os valores $2Q_{\text{mv}}$ inferidos a partir da curva de dispersão e os valores de $2\pi - Q_{(2c)}$ inferidos a partir das curvas de $\langle S_Q^z \rangle_t$, ver Tabela 4.7, a qual apresenta analogias com a Tabela 3.3.

A criticalidade será indicada pelo par $J_c^{(2)}$ e $Q_{(2c)}$. Na Figura 4.15 há indicação de uma divergência

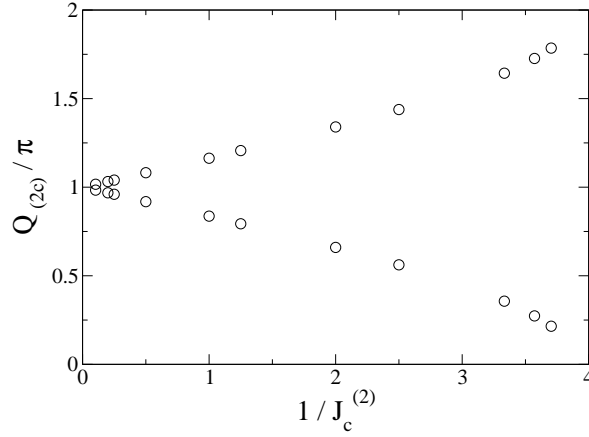


Figura 4.15: $Q_{(2c)}$ vs $1/J_c^{(2)}$. $N = 1200$. $J^{(1)} = 1$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). Nesta figura, $Q_{(2c)}$ corresponde ao modo que mais se assemelha ao modo crítico do sistema infinito. Esta figura corresponde à Tabela 4.7. Essas curvas apresentam analogia com as curvas associadas a Q_A da Figura 3.23.

$J_c^{(2)} \rightarrow \infty$ quando $Q_{(2c)} \rightarrow \pi$. Além disso, foi constatado que a evolução do modo $\langle S_Q^z \rangle_t$, para $Q = \pi$, é independente de $J^{(2)}$ e não é crítica⁴. Essas características garantem que nenhum $Q_{(2c)}$ corresponde a $J^{(2)} \rightarrow \infty$. A ausência de criticalidade em $J^{(2)} \rightarrow \infty$ faz sentido. Uma vez que $J^{(1)} = 1$ é mantido finito, o limite $J^{(2)} \rightarrow \infty$ corresponde ao desacoplamento da cadeia em duas cadeias independentes, e em cada uma $J^{(2)}$ desempenha o papel de interações entre primeiros vizinhos. O único spin girado do estado inicial fica em uma das cadeias, a qual desenvolve a dinâmica sem criticalidade característica de uma cadeia com apenas interações entre primeiros vizinhos, no subespaço de uma onda, enquanto a outra cadeia recebe um estado ferromagnético e permanece sem dinâmica.

Tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial

O tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial da magnetização para cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ está indicado na Figura 4.16. Entre os modos com menor t_r está aquele que indica a criticalidade $Q_{(2c)}$. O $t_r(Q_{(2c)})$ não está exatamente no mínimo possivelmente devido ao fato de o sistema ser finito. Entende-se que para um Hamiltoniano dado, o modo crítico deva mesmo ser aquele que apresenta reconstrução parcial mais cedo que os demais. O modo crítico, caracterizado por extinguir-se mais lentamente que os demais modos, está associado a um maior número de parcelas da somatória (4.50) interferindo construtivamente, do que os modos não críticos. Os processos de interferência construtiva mais pronunciados favorecem a ocorrência da reconstrução parcial mais cedo.

Para a criticalidade do tipo (A) do Hamiltoniano XY(h, γ), o tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial do modo que indica a criticalidade Q_A também está próximo do mínimo da curva

⁴As formas das funções $\langle S_Q^z \rangle_t$ vs t variam suavemente quando Q varia. Porém quando Q muda de $\pi - \frac{2\pi}{N}$ para π a forma de $\langle S_Q^z \rangle_t$ muda bruscamente.

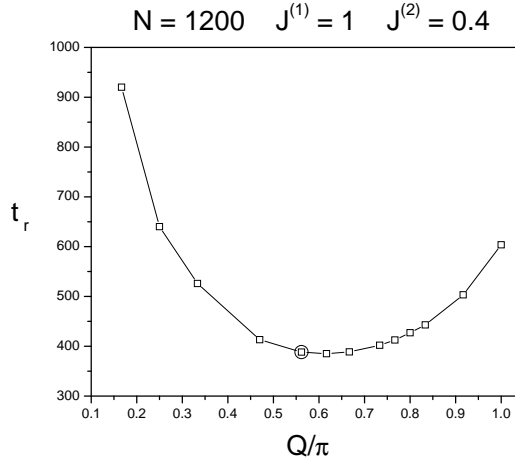


Figura 4.16: Tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial de $\langle S_Q^z \rangle_t$ (4.4) ou (4.50). t_r vs Q . $N = 1200$, $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.4$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). O círculo nesta figura indica o t_r correspondente a $Q_{(2c)}$, o qual indica a marca da criticalidade do sistema infinito neste sistema finito. À criticalidade corresponde t_r próximo ao mínimo da curva. Esta curva assemelha-se à curva de t_r^- vs Q da Figura 3.25. Os tempos t_r estão em unidades arbitrárias.

t_r^- vs Q , Figura 3.25 (a). Entretanto, para a criticalidade do tipo (B) do Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$ e para a criticalidade do Hamiltoniano $XY(\gamma)$, os respectivos tempos transcorridos até a primeira reconstrução parcial não estão próximos dos mínimos da curva t_r^+ vs Q e t_r vs Q , Figura 3.25 (a) e Figura 3.7 (a).

Ajustes ν e τ , $J^{(2)} = 0.4$

Realizaram-se ajustes com a forma de lei de potência (3.43), nas envolturas superiores de $\langle S_Q^z \rangle_t$, para $J^{(2)} = 0.4$ em cadeias com 1200 sítios. As envolturas foram selecionadas como indicado na Figura 3.11. Exemplos de modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ estão na Figura 4.17. Os resultados referentes aos ajustes para os parâmetros ν e τ estão apresentados na Figura 4.18. O valor de $Q_{(2c)}$ inferido a partir desses ajustes coincide com o correspondente valor apresentado na Tabela 4.7, o qual havia sido inferido pela inspeção dos gráficos dos mesmos modos. ν apresenta o valor de cerca de $\frac{1}{2}$ para os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ não críticos, e o valor de $0.345 \sim \frac{1}{3}$ para o modo crítico. Observa-se também a presença de modos cuja relaxação é mais rápida na faixa de $0.6 < \frac{Q}{\pi} < 0.75$.

Patamar de oscilação tende a zero no limite de cadeias grandes

A Figura 4.19 indica que no limite de cadeias grandes o patamar de oscilação do modo crítico $Q_{(2c)}$ tende a zero. Isso assegura que todos os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$, além do modo crítico, tendem a desaparecer. Trata-se da condição necessária para que o estado de equilíbrio seja caracterizado por magnetização espacialmente homogênea, o que reflete a simetria de translação do Hamiltoniano.

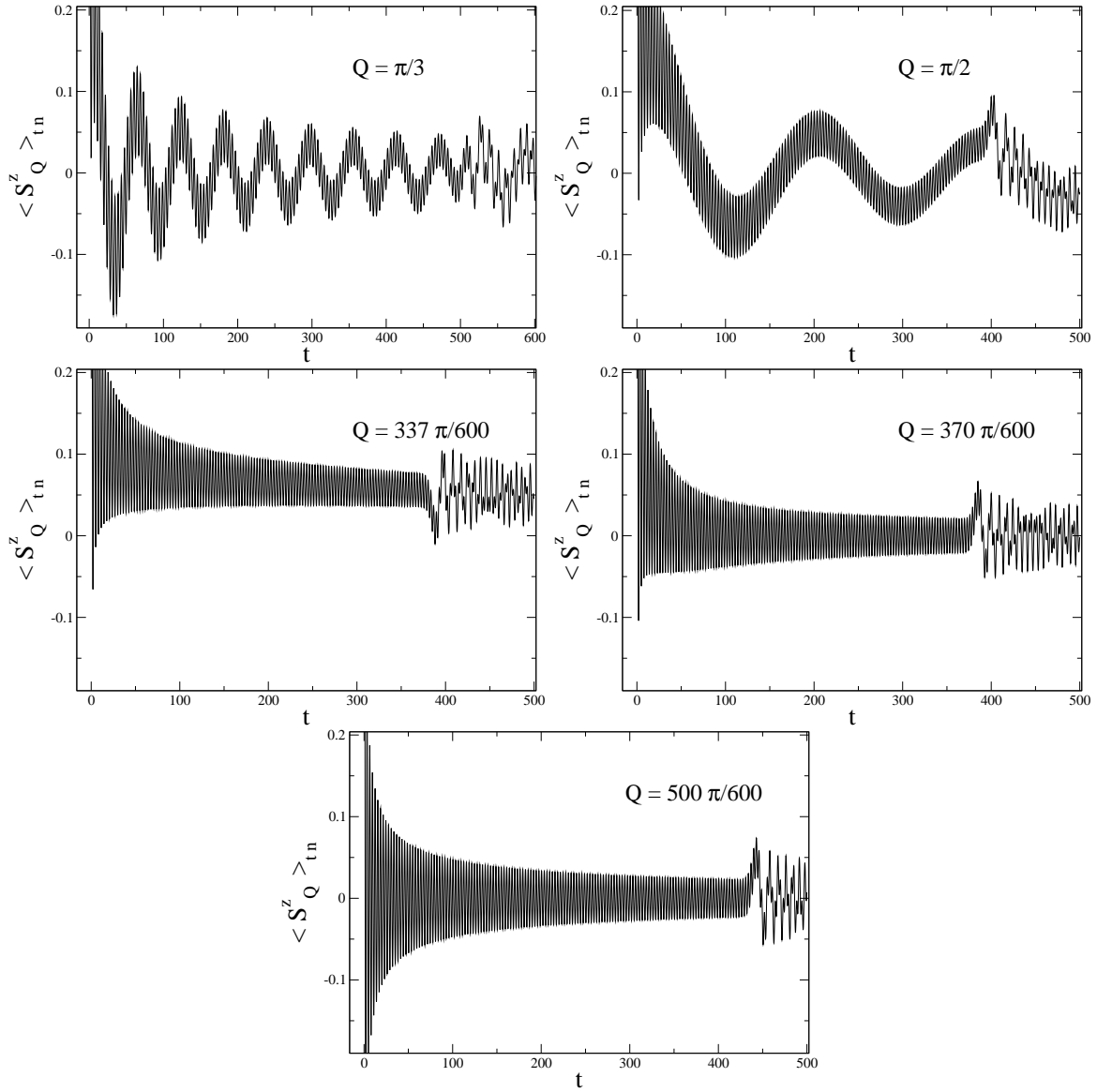


Figura 4.17: $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t (4.4) ou (4.50), detalhes. $N = 1200$, $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.4$, estado inicial, $|1\rangle$. $Q = \frac{\pi}{3}$, relaxação usual com $\nu \sim \frac{1}{2}$. $Q = \frac{\pi}{2}$, batimentos, não se fazem ajustes de ν e τ . $Q = \frac{337}{600}\pi$, corresponde ao modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ que oscila ao redor de um patamar acima de zero mais alto que qualquer outro modo; sob esse critério é o modo que mais se assemelha ao modo crítico $Q_{(2c)}$ do sistema infinito. $Q = \frac{370}{600}\pi$, relaxação rápida mas cuja envolvente pode ser ajustada por uma lei de potência. $Q = \frac{5}{6}\pi$, relaxação usual com $\nu \sim \frac{1}{2}$. Esta Figura apresenta analogias com a Figura 3.19. O tempo t está em unidades arbitrárias.

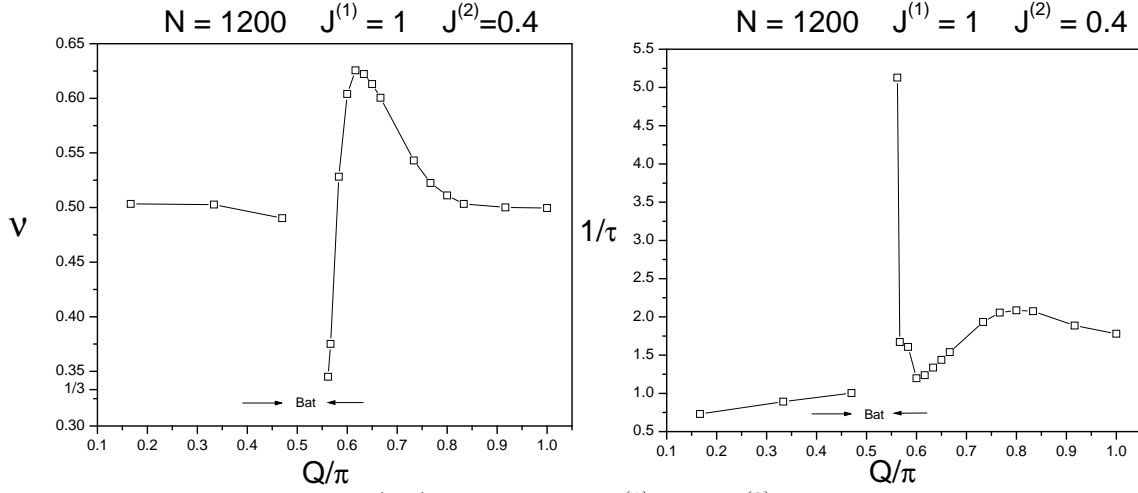


Figura 4.18: Ajustes de ν e τ em $\langle S_Q^z \rangle_t$. $N = 1200$, $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.4$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39).

(a) ν vs Q . (b) $\frac{1}{\tau}$ vs Q .

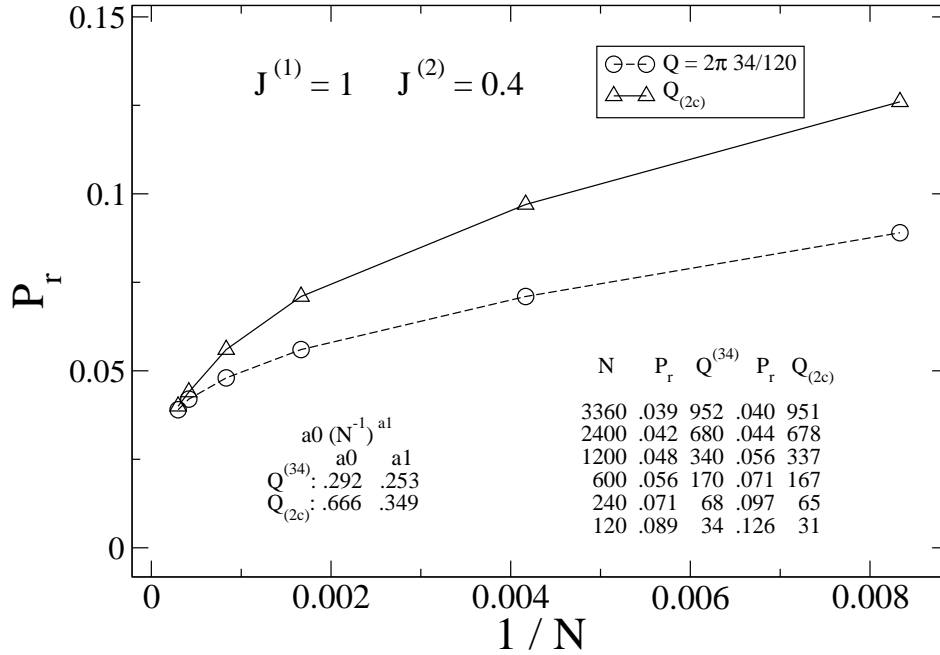


Figura 4.19: Patamar de oscilação de $\langle S_Q^z \rangle_t$ logo antes de manifestar-se a primeira reconstrução parcial da magnetização. P_r vs $1/N$. $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.4$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). Esta Figura apresenta analogias com a Figura 3.24.

4.4.3 uma onda com impurezas

As impurezas foram introduzidas como indicado na seção 2.3.4, Equação (2.43) e na Figura 2.2, onde foram considerados dois tipos de impurezas. Assim como nos outros Hamiltonianos XXZ, analisados nas

seções 4.4.1 e 4.4.2, a evolução dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ no subespaço de uma onda de spin é desacoplada dos outros subespaços de S^z , apesar da presença desses tipos de impurezas.

Tomando-se estados iniciais do tipo produto direto (4.39), emergem processos de relaxação caracterizados por oscilações amortecidas por uma lei de potência. Se o estado inicial tiver seu spin girado em um sítio que participa de uma ligação da impureza, e se houver um *gap* no espectro da banda de uma onda de spin, emergem processos ainda mais lentos.

Os processos de relaxação mais lenta nos sistemas com impurezas não apresentam as criticalidades presentes nos Hamiltonianos $XY(\gamma)$, $XY(h, \gamma)$ e $XX(J^{(2)})^{\text{onda}}$. Ao invés de $\langle S_Q^z \rangle_t$ exibir criticalidade nas vizinhanças de um número de onda crítico, há uma ‘faixa larga’ de números de onda Q para os quais cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ oscila em torno de um valor médio não nulo. Esse patamar não nulo corresponde a uma parcela constante na expressão (4.4), e não tende a zero no limite de tempos longos em cadeias grandes como nos casos da criticalidade do tipo (A) presente no Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$ e da criticalidade presente no Hamiltoniano $XX(J^{(2)})^{\text{onda}}$. O patamar de oscilação é máximo para $Q = 0$, tende a diminuir quanto maior for o número de onda Q , e pode anular-se para $Q = \pi$, Figura 4.20, pode anular-se para Q menores que π e pode não se anular para nenhum Q . As diferentes possibilidades dependem de Δ e $J^{(\text{imp})}$. A existência de patamares não nulos até a primeira reconstrução parcial da magnetização indica que no equilíbrio o sistema é caracterizado por magnetização espacialmente não homogênea, o que reflete a falta de simetria de translação do Hamiltoniano. O mesmo comportamento qualitativo ocorre quer haja uma ou duas ligações de troca associadas à impureza, (2.43) e Figura 2.2.

A presença de pelo menos um *gap* no espectro de uma onda está indicada na Figura 2.3. Os níveis de energia que podem surgir dentro do *gap* g_a , Figura 2.3, não parecem ser determinantes para a relaxação lenta dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$, como o é a existência de pelo menos um *gap*.

Quando a dinâmica começa a partir de um estado do tipo produto direto (4.39), cujo spin girado esteja em um sítio distante da impureza, ou mesmo estando o spin girado vizinho à impureza se não houver *gap* na banda de uma onda de spin, $J^{(\text{imp})} < 1$ e $\Delta < 1$, emerge relaxação amortecida por uma lei de potência com expoente $\frac{1}{2}$, onde todos os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ oscilam em torno de zero, assim como nos Hamiltonianos previamente analisados.

Os processos de relaxação para os quais surgem modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ que não se extinguem completamente, quando há impurezas nas cadeias de spin, são distintos das criticalidades analisadas neste trabalho. Tais processos são mais particulares porque são válidos para um tipo de estado inicial mais restrito que os estados iniciais associados às criticalidades previamente analisadas: produto direto cujo spin girado esteja em um sítio que participa de uma ligação da impureza, ou em um sítio próximo. Além disso, o *gap* na banda de uma onda de spin é necessário para o surgimento daqueles processos. Outro aspecto a ser notado é que o sistema com impurezas é não integrável, de maneira que a existência de processos lentos também pode estar associada a não integrabilidade.

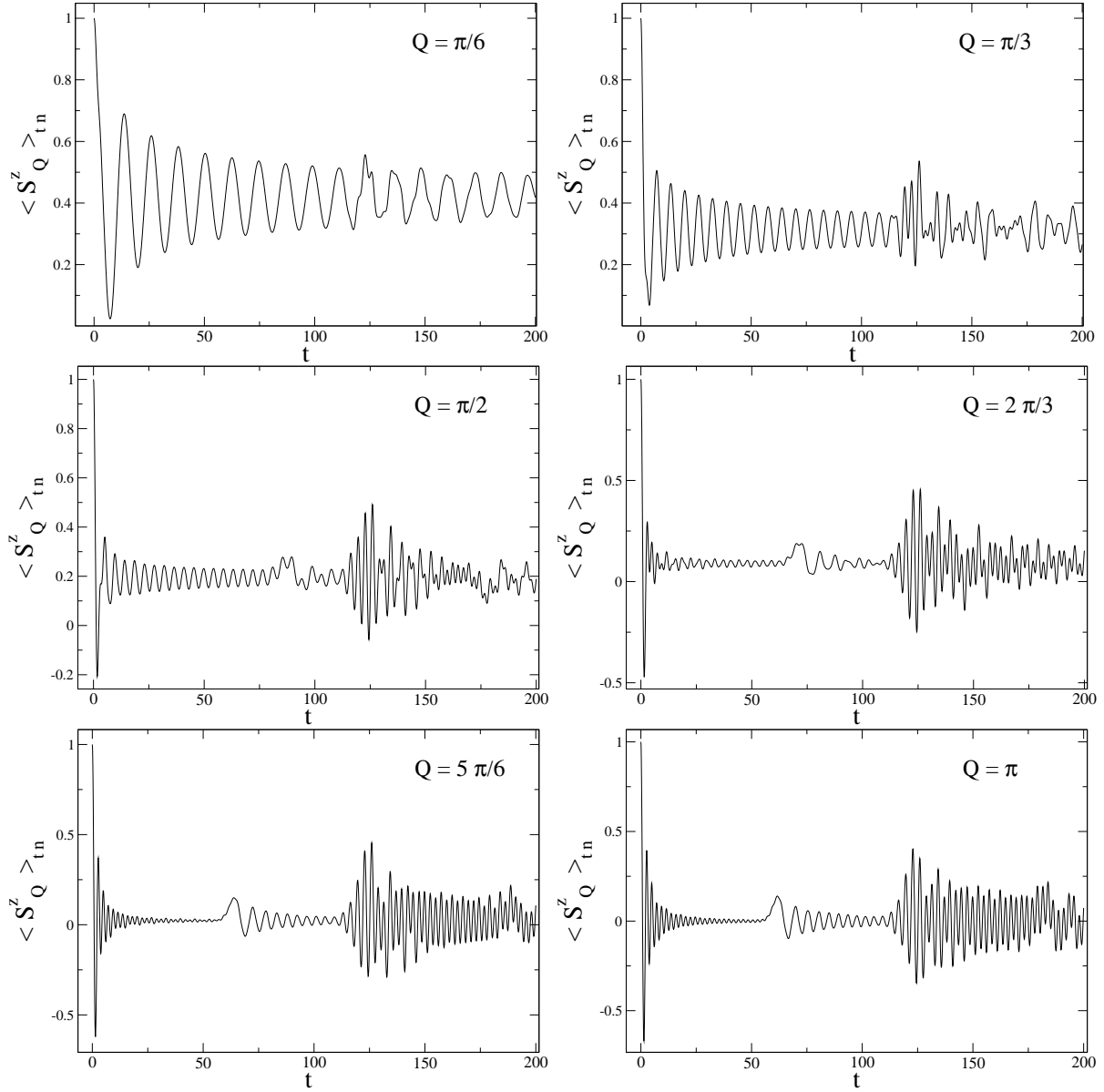


Figura 4.20: Relaxação para um estado de equilíbrio caracterizado por magnetização espacialmente não homogênea. $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t . $N = 120$, $\Delta = 1.8$, $J^{(\text{imp})} = 1.9$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). O spin girado do estado inicial está localizado em um sítio que participa da interação de troca da impureza. A impureza é descrita por uma ligação de troca diferente das demais. O tempo t está em unidades arbitrárias.

4.5 XXZ — duas ondas

Os estados de duas ondas de spin não serão analisados, assim como os estados de uma onda não faziam parte do objetivo principal da seção anterior 4.4. Uma base de estados do tipo produto direto

para o subespaço de duas ondas é formada por estados com $N - 2$ spins apontando em uma direção e *dois* spins na direção oposta (4.51). Há dois subespaços de duas ondas de spin. Ambos originam evoluções equivalentes da magnetização, quando não há campos externos. A expressão *subespaço de duas ondas* fará referência indistintamente a qualquer um dos dois subespaços. Os estados iniciais sondados nesta seção são os do tipo produto direto com dois spins girados,

$$|l_1, l_2\rangle = |\uparrow\uparrow \cdots \uparrow (l_1:\downarrow) \uparrow \cdots \uparrow (l_2:\downarrow) \cdots \uparrow\rangle, \quad (4.51)$$

em particular serão apresentadas as evoluções da magnetização a partir dos estados $|1, 2\rangle$, $|1, \frac{N}{4}\rangle$ e $|1, \frac{N}{2} + 1\rangle$.

De maneira distinta ao que acontece quando a dinâmica está restrita ao subespaço de uma onda, não se verifica (4.44), e a evolução da magnetização depende do parâmetro de anisotropia Δ do Hamiltoniano XXZ. Nesta seção será exibido o comportamento qualitativo da evolução da magnetização.

No limite do Hamiltoniano planar XX, $\Delta = 0$, os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ evoluem da mesma maneira para qualquer estado inicial $|l_1, l_2\rangle$ (4.51) e coincidem, até a primeira reconstrução parcial, com a evolução a partir do produto direto $|l\rangle$ (4.39) contido no subespaço de uma onda, Figura 4.21 (a), (c) e (e). Para o Hamiltoniano planar XX o subespaço de duas ondas de spin está associado ao Hamiltoniano fermiônico NCC , Tabela 3.1, para qualquer N par, enquanto que o subespaço de uma onda está associado ao Hamiltoniano fermiônico CC , seção 4.4.1. A não coincidência entre as evoluções a partir dos estados $|l_1, l_2\rangle$ e $|l\rangle$ manifesta-se após a primeira reconstrução parcial, Figura 4.21 (c).

O resultado mais significativo desta seção consiste no fato de que a função $\langle S_Q^z \rangle_t$ não tem a mesma forma para $\Delta = 0$ e $\Delta \neq 0$. Em geral para $\Delta \neq 0$ $\langle S_Q^z \rangle_t$ não tem máximos locais, ou mínimos locais, em ordem decrescente, ou crescente, até a primeira reconstrução parcial. Tomando-se $Q = \frac{5\pi}{6}$, $\Delta = 1$ e estado inicial $|1, 2\rangle$ essa característica é facilmente notada, Figura 4.21 (b). Nesse sentido o amortecimento de $\langle S_Q^z \rangle_t$ não é tão suave como no caso de $\Delta = 0$. Para os mesmos Q e Δ e para o estado inicial $|1, 37\rangle$, Figura 4.21 (f), novamente nem todos os máximos locais estão em ordem decrescente, embora isso seja menos notável. A partir do estado $|1, 18\rangle$, Figura 4.21 (d), $\langle S_Q^z \rangle_t$ assemelha-se à curva do caso de $\Delta = 0$ até a primeira reconstrução parcial, porém para esse mesmo estado inicial e para outro número de onda, $Q = \frac{3\pi}{4}$, a evolução de $\langle S_Q^z \rangle_t$ é distinta daquela no caso de $\Delta = 0$, Figura 4.22.

Na presença de interações entre segundos vizinhos a evolução de cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t$, a partir de um produto direto $|l_1, l_2\rangle$ (4.51) e para $\Delta \neq 0$, envolve grande número de parcelas na somatória (4.4). O tempo de processamento computacional cresce muito, e foram feitos cálculos para cadeias com até 36 sítios. A primeira reconstrução parcial da magnetização nesses sistemas não permite verificar se a relaxação é suave ou não. Entretanto, *parece* não haver aquela criticalidade que surge quando o estado inicial tem apenas um spin girado, seção 4.4.2. Esses resultados não serão apresentados. A presença de impurezas no subespaço de duas ondas gera padrões de comportamento distintos e irregulares, quando

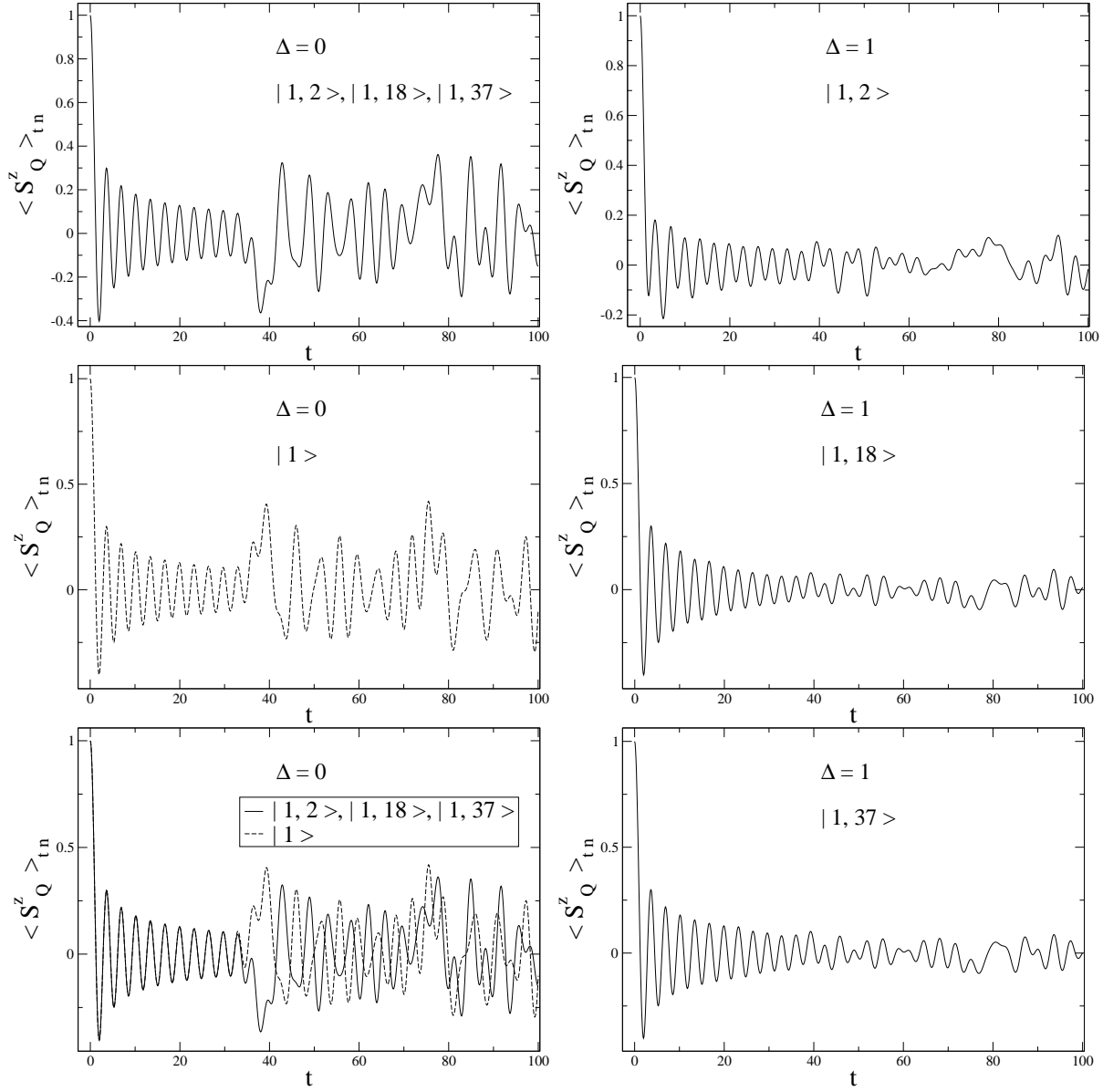


Figura 4.21: $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 72$, $Q = \frac{5\pi}{6}$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) XX, $\Delta = 0$, $|1, 2\rangle$, $|1, 18\rangle$ ou $|1, 37\rangle$. (b) XXZ, $\Delta = 1$, $|1, 2\rangle$. (c) XX, $\Delta = 0$, $|1\rangle$. (d) XXZ, $\Delta = 1$, $|1, \frac{N}{4} = 18\rangle$. (e) XX, $\Delta = 0$, $|1\rangle$ e $|1, 2\rangle$. (f) XXZ, $\Delta = 1$, $|1, \frac{N}{2} + 1 = 37\rangle$.

se varia os parâmetros de impureza, de anisotropia da interação de troca, e o estado inicial, de maneira que tais resultados também não serão apresentados.

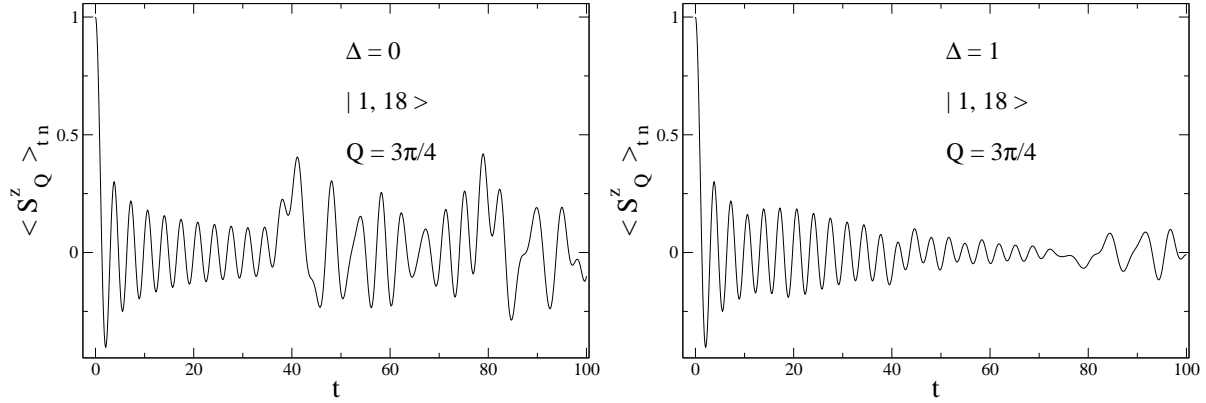


Figura 4.22: $\text{Re}[\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0]$ vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 72$, $Q = \frac{3\pi}{4}$. Estado inicial, $|1, \frac{N}{4} = 18\rangle$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) XX, $\Delta = 0$, (b) XXZ, $\Delta = 1$.

4.6 Recorrência e Fidelidade

4.6.1 Motivação

Uma das principais conclusões apresentadas neste Capítulo, referente à relaxação da magnetização, enuncia que para se atingir o comportamento de um sistema com muitos graus de liberdade, o mais relevante é que a dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução do estado inicial seja ‘grande’, e não necessariamente que o número de sítios da cadeia seja ‘grande’, seção 4.3.4, página 91. Pretende-se identificar reconstruções parciais do estado inicial no estado evoluído no tempo. O objetivo deste cálculo é verificar se os tempos transcorridos até as reconstruções parciais do estado inicial, se forem bem definidas, é proporcional ao número de sítios da cadeia ou à dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução do estado inicial. Algumas evoluções periódicas também serão analisadas.

4.6.2 Definições

Será quantificado o quão próximo ou afastado do estado inicial está o estado evoluído no tempo. Foram calculadas duas grandezas que quantificam a relação entre os estados $|\psi_0\rangle$ e $|\psi(t)\rangle$. A Recorrência definida por [16],

$$R(t) = || |\psi(t)\rangle - |\psi_0\rangle ||^2, \quad (4.52)$$

e a fidelidade, módulo ao quadrado da sobreposição dos dois estados,

$$F(t) = | \langle \psi(t) | \psi_0 \rangle |^2. \quad (4.53)$$

A sobreposição $\langle \psi_0 | \psi(t) \rangle$ é chamada por [17] de correlação de amplitudes. Para sistemas de dois spins há também uma definição diferente para a fidelidade de um estado: trata-se da máxima sobreposição de

Tabela 4.8: Recorrência e Fidelidade de alguns estados.

R	0	2	4
		$ \psi(t)\rangle \perp \psi_0\rangle,$	
	$ \psi(t)\rangle = \psi_0\rangle$	$ \psi(t)\rangle = \pm i \psi_0\rangle,$	$ \psi(t)\rangle = - \psi_0\rangle$
		ou outros	
F	1	0	
	$ \psi(t)\rangle = e^{i\phi} \psi_0\rangle$	$ \psi(t)\rangle \perp \psi_0\rangle$	

tal estado com um estado maximamente emaranhado [18]. Para as definições (4.52) e (4.53) verificam-se os casos particulares mostrados na Tabela 4.8.

A recorrência e a fidelidade estão relacionadas através de,

$$\begin{aligned} R(t) &= 2 (1 - \text{Re}[\langle \psi(t) | \psi_0 \rangle]) = 2 (1 - |\langle \psi(t) | \psi_0 \rangle| \cos \delta) \\ &= 2 (1 - \sqrt{F} \cos \delta). \end{aligned} \quad (4.54)$$

Em termos do estado inicial, dos autovalores e auto-estados,

$$R(t) = 2 \left(1 - \sum_{\zeta} |\langle \zeta | \psi_0 \rangle|^2 \cos E_{\zeta} t \right), \text{ e} \quad (4.55)$$

$$F(t) = \left| \sum_{\zeta} |\langle \zeta | \psi_0 \rangle|^2 e^{\pm i E_{\zeta} t} \right|^2, \quad (4.56)$$

onde $|\psi_0\rangle$ (4.1), E_{ζ} e $|\zeta\rangle$ (2.32), e o cálculo será feito na base de estados do tipo produto direto $|M_I\rangle$. Ou então, através da diagonalização onde se utilizam as simetrias espaciais, tomam-se $|\psi_0\rangle$ (4.25), $E_{r\zeta}$ e $|r\zeta\rangle$ (2.35), e o cálculo será feito na base de estados do tipo $|P_r^{\beta}\rangle$. O sinal do argumento da exponencial na expressão da fidelidade pode ser qualquer, porém a mesma escolha deve ser usada para todas as parcelas da somatória. Deve-se notar que nas expressões de R e F , (4.55) e (4.56), as frequências são autovalores do Hamiltoniano, enquanto que nas expressões da evolução da magnetização, (4.2) e (4.27), as frequências são diferenças entre pares de autovalores do Hamiltoniano. As expressões de $R(t)$ e $F(t)$ foram obtidas tomando-se $J^{(1)} = 1$, para o Hamiltoniano (2.1), e $\hbar = 1$. O tempo t está em unidades arbitrárias.

4.6.3 Reversibilidade

Já foi mostrado, por exemplo nas Figuras 3.4 e 4.5, que a dinâmica da magnetização exibe comportamento reversível ou irreversível dependendo do estado inicial, do Hamiltoniano, e do número de sítios

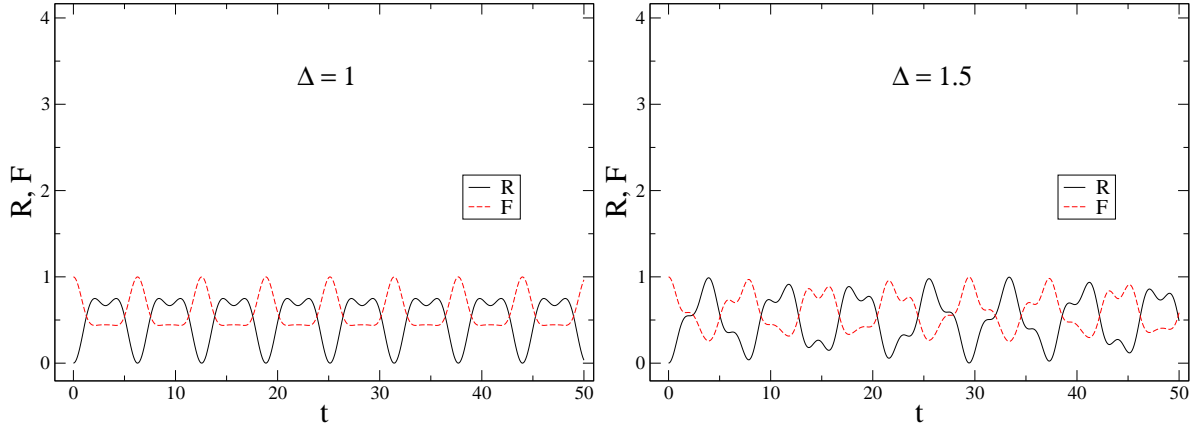


Figura 4.23: R vs t e F vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 4$. Estado inicial, $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) XXX, $\Delta = 1$. (b) XXZ, $\Delta = 1.5$.

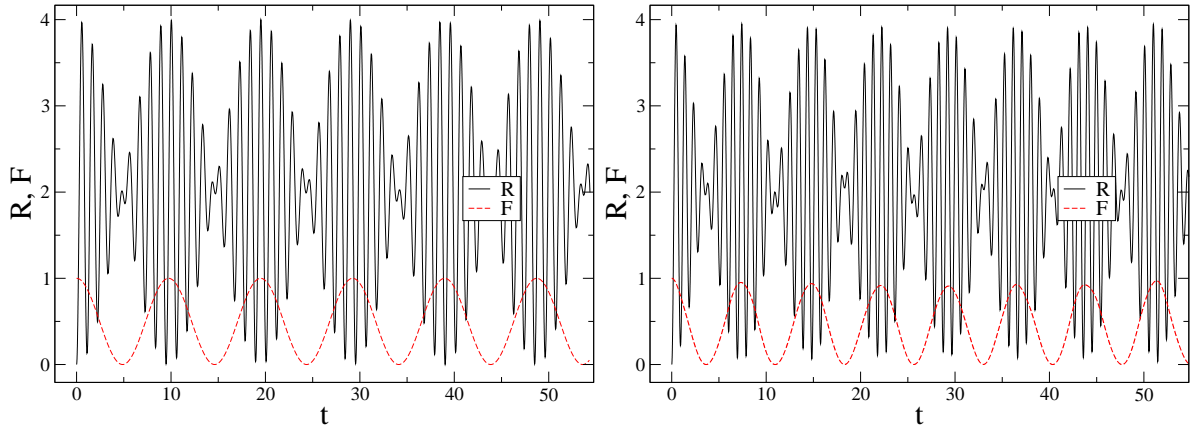


Figura 4.24: R vs t e F vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 14$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|r_1 \zeta_1\rangle + |r_2 \zeta_2\rangle)$, $r_1: \mu = I, 1$, $\zeta_1 = 1$; $r_2: \mu = II, 1$, $i = 1$, $\zeta_2 = 1$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) XXX, $\Delta = 1$, $E_{r_1 \zeta_1} = -5.95644382$, $E_{r_2 \zeta_2} = -5.31172108$. (b) XXZ, $\Delta = 1.5$, $E_{r_1 \zeta_1} = -7.20400879$, $E_{r_2 \zeta_2} = -6.34682789$.

do sistema. Agora deseja-se investigar a reversibilidade da dinâmica analisando-se a evolução do estado quântico ao invés de sua magnetização.

Verifica-se evolução reversível, periódica, caracterizada por frequências de Rabi e reconstruções totais dos valores iniciais de R e F , no sistema pequeno com quatro sítios, a partir de um estado inicial do tipo produto direto, quando o Hamiltoniano é o Heisenberg isotrópico, Figura 4.23 (a). Alterando-se o parâmetro de anisotropia do Hamiltoniano para $\Delta = 1.5$, não se verifica reversibilidade, Figura 4.23 (b). A diferença entre esses dois comportamentos decorre do fato de que no primeiro caso todos os autovalores do Hamiltoniano, no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , são comensuráveis entre si, enquanto

no segundo caso há indicação de que nem todos os autovalores sejam comensuráveis entre si.⁵ Uma particularidade associada ao sistema pequeno, Figura 4.23, é que o estado evoluído não se distancia do estado inicial a ponto de ambos tornarem-se ortogonais, $R = 2$ e $F = 0$. O aspecto ao qual se deseja chamar atenção, no sistema com quatro sítios, consiste no fato de ser possível emergir reversibilidade da evolução do estado quântico, a partir de um estado do tipo produto direto.

Para um sistema maior, com 14 sítios por exemplo, a evolução a partir de um estado do tipo produto direto não é reversível, como será mostrado na seção 4.6.5. Para esses sistemas emergem evoluções reversíveis somente a partir de estados particulares, como por exemplo superposições de dois auto-estados, Figura 4.24 (a). Um detalhe a ser observado na Figura 4.24 (a) é que se $F = 0$, o que corresponde à ortogonalidade dos estados, então $R = 2$. Por outro lado, se $F = 1$, o que corresponde a estados diferindo apenas por uma fase global, então R pode assumir qualquer valor entre 0 e 4, como indica (4.54) e como está exemplificado na Tabela 4.8. A fidelidade F apresenta um comportamento reversível e periódico, onde há reconstruções totais do valor inicial, um , e uma frequência de Rabi. Não se deve estranhar que a evolução de F na Figura 4.24 (a) apresente apenas um termo associado a uma frequência não nula somado a uma parcela constante. Apesar de a somatória (4.56) envolver, para a superposição de dois auto-estados não degenerados, duas exponenciais com frequências distintas, deve-se tomar o quadrado do seu módulo, de maneira que se obtém,

$$F(t)^{\text{Figura 4.24}} = \frac{1}{2} (1 - \cos(E_{r_1 \zeta_1} - E_{r_2 \zeta_2}) t). \quad (4.57)$$

No exemplo mostrado na Figura 4.24 (a), a recorrência R não apresenta um comportamento reversível e periódico. Isso decorre do fato de haver soma de dois cossenos com frequências incomensuráveis entre si,

$$R(t)^{\text{Figura 4.24}} = 2 \left(1 - \frac{1}{2} (\cos E_{r_1 \zeta_1} t + \cos E_{r_2 \zeta_2} t) \right). \quad (4.58)$$

Alterando-se o parâmetro de anisotropia do Hamiltoniano para $\Delta = 1.5$, XXZ, a fidelidade F apresenta aparentemente um comportamento reversível e periódico, Figura 4.24 (b). Porém uma inspeção detalhada, não exibida na Figura 4.24 (b), mostra que o valor inicial de F , um , não é reconstruído e a curva não é rigorosamente periódica.

4.6.4 Uma e Duas ondas

As evoluções da recorrência e da fidelidade foram calculadas a partir de estados iniciais do tipo produto direto contidos separadamente nos subespaços de uma e duas ondas de spin: $|1\rangle$, (4.39), Figura 4.25, $|1, 2\rangle$ e $|1, 1 + \frac{N}{2}\rangle$, (4.51), Figuras 4.26 e 4.27. O estado evoluído no tempo direciona-se a um subespaço

⁵Autovalores, $\Delta = 1$: -2, -1, 0, 0, 0, 1. $\Delta = 1.5$: -2.35078106, -1.5, 0, 0, 0, 0.850781059. No cálculo numérico os números irracionais não podem surgir verdadeiramente, devido à limitação da precisão do cálculo.

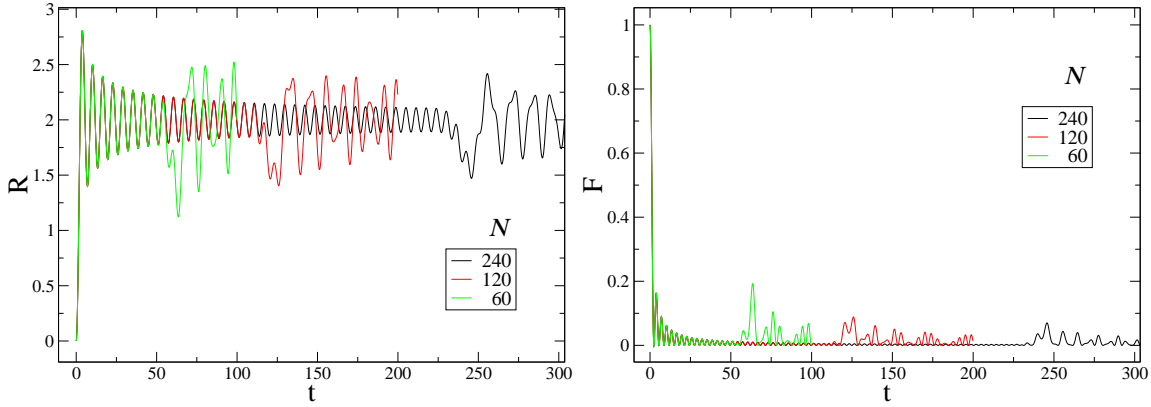


Figura 4.25: R vs t e F vs t . $N = 240, 120$ e 60 , XX, $\Delta = 0$, $J^{(1)} = 1$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). Subespaço de uma onda de spin. O tempo t está em unidades arbitrárias.

ortogonal ao estado inicial, o que se caracteriza pelo fato de a recorrência e a fidelidade tenderem para valores 2 e 0, respectivamente, através de oscilações amortecidas. Esse processo é um tipo de relaxação, a qual seria finalmente atingida se as grandezas R e F passassem a ser independentes do tempo. A relaxação não se completa porque a recorrência e a fidelidade exibem reconstruções parciais de seus valores iniciais, as quais são características do sistema finito. A relaxação da evolução da recorrência e da fidelidade é distinta da relaxação da magnetização tratada nos Capítulos 3 e 4. Porém, compartilham uma característica em comum: a evolução temporal do sistema direciona a quantidade de interesse para um valor independente do tempo.

As reconstruções parciais são nitidamente evidentes. O resultado que mais interessa para a discussão enunciada na seção 4.6.1 consiste no fato de que o tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial é proporcional ao número de sítios N da cadeia,

$$\begin{aligned} t_r^{RF\ 1o}(|1\rangle) &\approx N, & \forall \Delta, \\ t_r^{RF\ 2o}(|1, 2\rangle) &\approx \frac{N}{2}, & t_r^{RF\ 2o}(|1, 1 + \frac{N}{2}\rangle) \approx 2N, & \Delta = 1. \end{aligned} \quad (4.59)$$

No caso do subespaço de uma onda de spin, a dimensão do subespaço coincide com N , enquanto que no caso do subespaço de duas ondas, a dimensão do subespaço é $(N^2 - N)/2$.

O fato de o tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial do estado, contido no subespaço de duas ondas, ser proporcional a N , e não à dimensão do subespaço, pode ser considerado como uma objeção à conclusão enunciada na seção 4.3.4. Pode ser um indício de que não apenas o comportamento da evolução de um estado, mas também a evolução de sua magnetização, dependa mais do número de sítios do que da dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução do estado inicial. Essa objeção não é verificada para estados com muitas interfaces contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z , próxima seção. Por enquanto já se percebe uma atenuante àquela objeção, notando-se que a proporcionalidade entre o tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial e o número de sítios

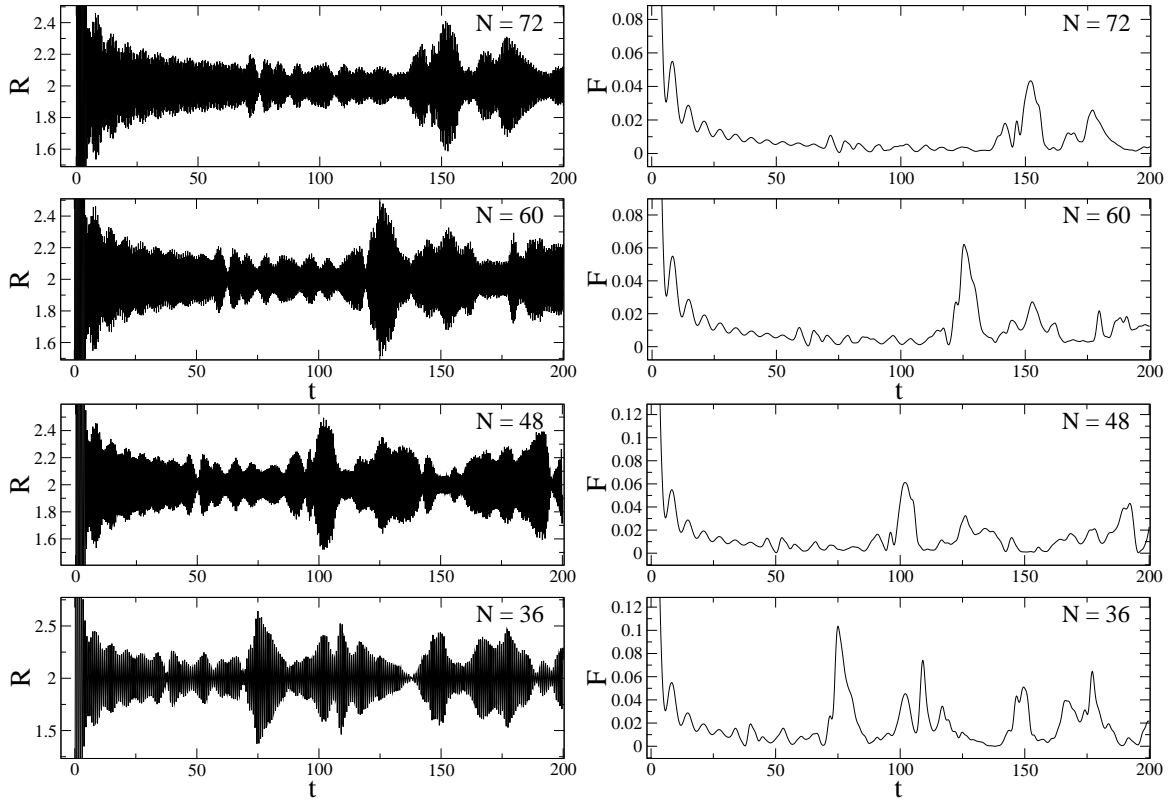


Figura 4.26: R vs t e F vs t , detalhes. $N = 72, 60, 48, 36$. XXZ, $\Delta = 1$, $J^{(1)} = 1$. Estado inicial $|1, 2\rangle$, (4.51), cujos dois spins girados estão em sítios vizinhos. Subespaço de duas ondas de spin. $R(0) = 0$ e $F(0) = 1$. O tempo t está em unidades arbitrárias.

depende do estado inicial, (4.59).

4.6.5 Autovalor nulo de S^z

estados com muitas interfaces

A evolução a partir de um estado do tipo produto direto com muitas interfaces entre spins para cima e para baixo é irreversível e direciona-se rapidamente para estados ortogonais ou quase ortogonais ao estado inicial, Figura 4.28, quando a dinâmica é gerada pelo Hamiltoniano XXZ com $\Delta \neq 0$. Trata-se de uma relaxação rápida. Não há reconstruções apreciáveis do estado inicial, para $\Delta = 0.5$ ou 1.5 , como há quando a dinâmica é gerada pelo Hamiltoniano planar XX, $\Delta = 0$. A ausência de reconstruções apreciáveis desde o instante inicial até $t = 300$, Figura 4.28, e até $t = 6000$, intervalo de tempo não exibido, indica que a relaxação rápida é característica de evoluções que envolvem grande quantidade de estados. Há uma correspondência entre dois processos de relaxação rápida: o direcionamento do estado evoluído no tempo para estados quase ortogonais ao estado inicial, e os processos de extinção das componentes de Fourier

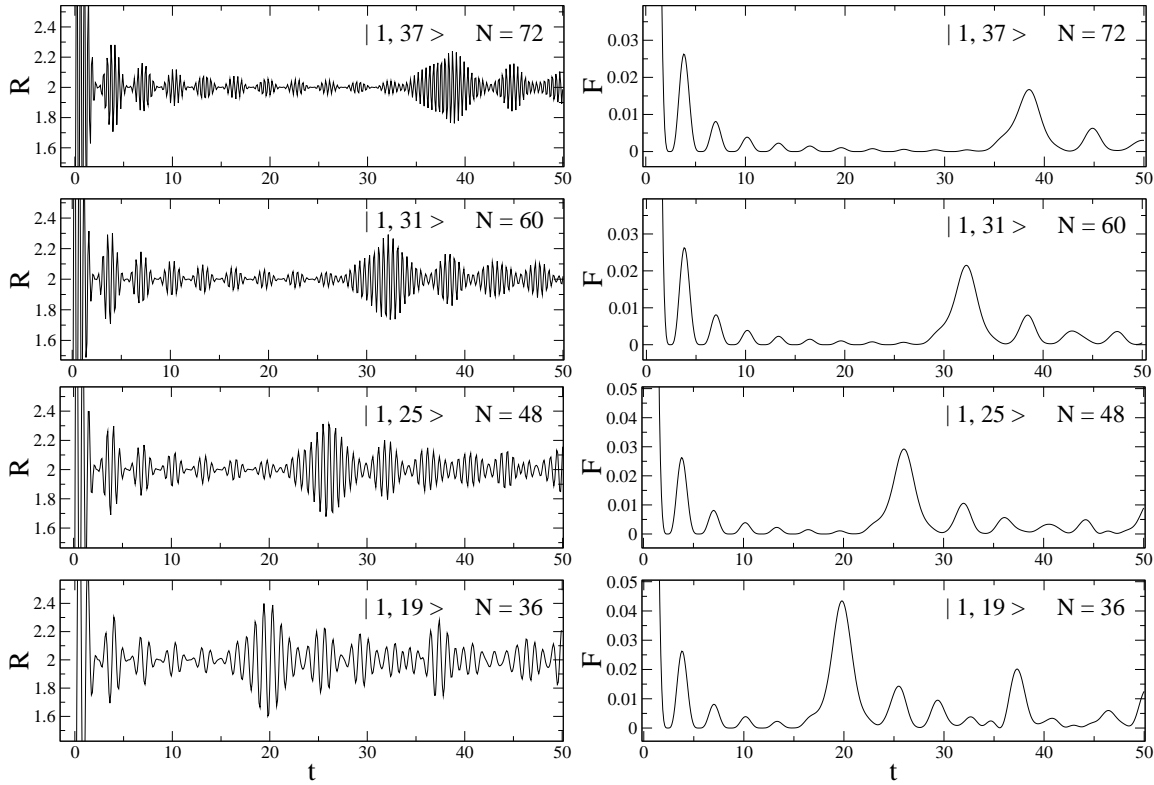


Figura 4.27: R vs t e F vs t , detalhes. $N = 72, 60, 48, 36$. XXZ, $\Delta = 1$, $J^{(1)} = 1$. Estado inicial $|1, 1 + \frac{N}{2}\rangle$, (4.51), cujos dois spins girados estão separados pela maior distância possível em uma cadeia com CCP. Subespaço de duas ondas de spin. $R(0) = 0$ e $F(0) = 1$. O tempo t está em unidades arbitrárias.

da magnetização, Figura 4.6, seção 4.3.4. Ambos processos foram observados a partir de um estado do tipo produto direto com muitas interfaces entre spins para cima e para baixo, no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z , para o sistema com 14 sítios. A presença ou ausência de um *gap* no espectro de energia não é relevante para esses processos.

Uma vez que não há reconstruções parciais evidentes, não se fala em uma proporcionalidade entre um tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial do estado inicial e o número de sítios N da cadeia, como ocorre nos subespaços de uma ou duas ondas de spin (4.59). Isso constitui uma importante indicação de que a evolução temporal, a partir desse estado inicial com muitas interfaces, está mais diretamente relacionada com a dimensão do espaço de estados acessíveis a ela do que com o número de sítios do sistema. Conclusão semelhante àquela obtida na seção 4.3.4.

Deve-se frisar a importância da dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução temporal do estado inicial. Ambos estados iniciais analisados nas Figuras 4.24 e 4.28 — superposição de dois autoestados e produto direto com muitas interfaces, respectivamente — estão definidos em uma cadeia com

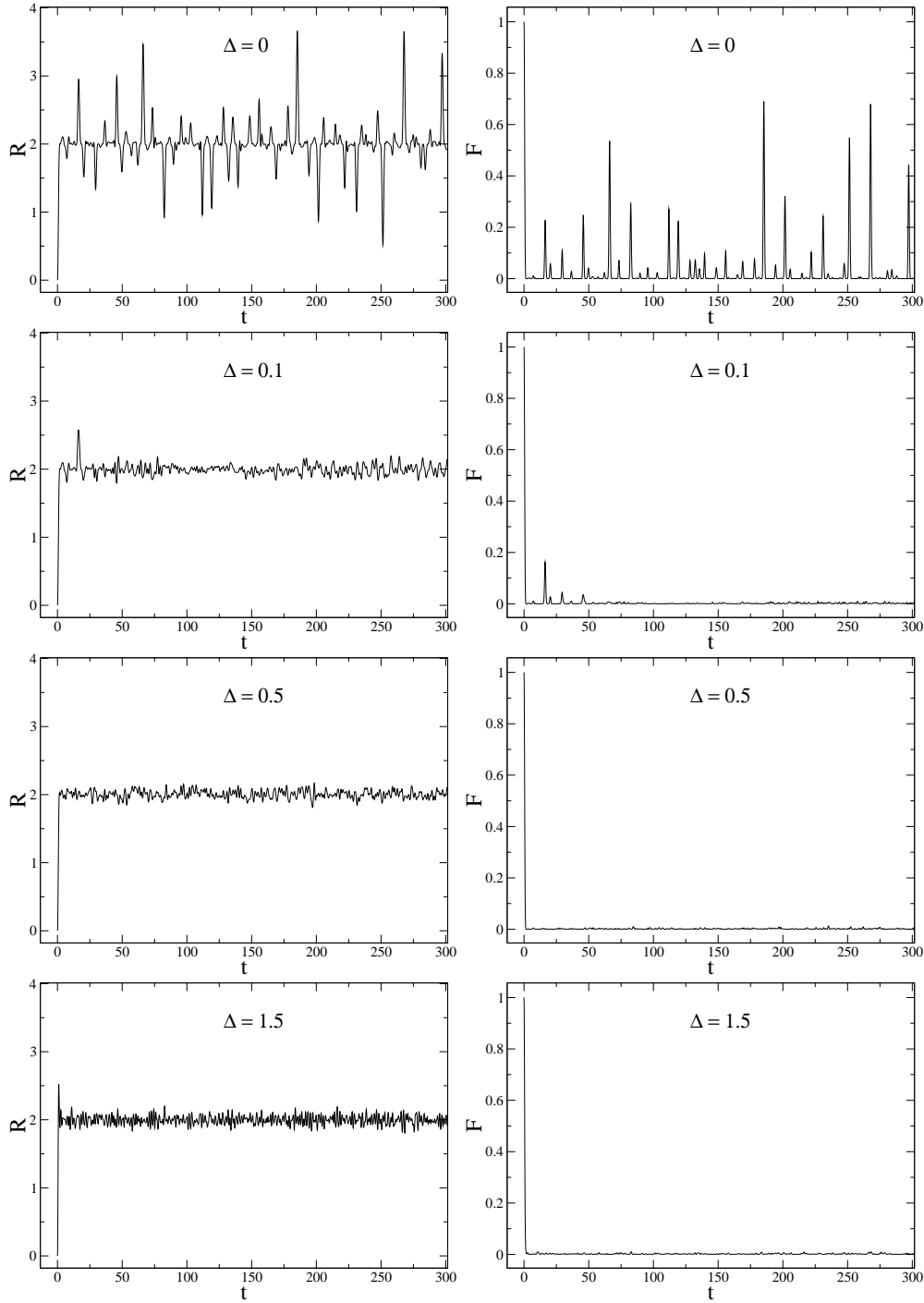


Figura 4.28: R vs t e F vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 14$, $\Delta = 0, 0.1, 0.5, 1.5$. Estado inicial, $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . R : coluna da esquerda, F : coluna da direita. Esta Figura deve ser comparada com a Figura 4.6. O tempo t está em unidades arbitrárias.

14 sítios e estão no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z . Porém a dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução temporal do estado inicial no primeiro caso é de apenas 2, e no segundo caso, para $\Delta = 1$, é 3423, Tabela 4.4.

estados do tipo parede

A evolução a partir de um estado do tipo parede apresenta irreversibilidade e é bastante sensível à presença de um *gap* no espectro de energia. Quando $\Delta \leq 1$ e $\Delta \neq 0$, o estado evoluído direciona-se rapidamente para estados ortogonais ou quase ortogonais ao estado inicial. Não apresenta reconstruções apreciáveis como no caso do Hamiltoniano planar XX, porém apresenta reconstruções maiores que aquelas mostradas nas Figuras 4.28 (c) e 4.28 (d). Para o Hamiltoniano planar XX, $\Delta = 0$, surgem reconstruções apreciáveis do estado inicial e não há tenedência de relaxação. Quando há *gap*, $\Delta > 1$, emerge um processo lento de direcionamento a estados quase ortogonais ao estado inicial. Esses casos estão mostrados na Figura 4.29.

Há uma correspondência entre dois processos: o direcionamento do estado evoluído no tempo para estados quase ortogonais ao estado inicial, e a extinção das componentes de Fourier da magnetização. Para $\Delta \leq 1$ e $\Delta \neq 0$ ambos processos são rápidos, enquanto que para $\Delta > 1$ ambos são lentos. As analogias podem ser notadas comparando-se as Figuras 4.7 e 4.29.

Esses resultados indicam que para o estado do tipo parede, em uma cadeia com 14 sítios, o sistema comporta-se como se estivesse próximo do limite de muitos graus de liberdade quando $\Delta \neq 0$. Tanto quando há processos rápidos ou lentos, os quais caracterizam relaxação. Apenas quando $\Delta = 0$ não emerge uma tendência de relaxação. Conforme já foi discutido na seção 4.3.4, para o Hamiltoniano planar XX — o qual tem uma versão fermiônica de férmions independentes em um subespaço de dimensão igual ao número de sítios N — há efeitos de tamanho em uma cadeia com 14 sítios que previnem qualquer relaxação, e o sistema permanece distante do limite de muitos graus de liberdade.

Superposições

Calcularam-se as evoluções de R e F a partir do estado de superposição de produtos diretos com muitas interfaces (4.37). Tais evoluções não foram exibidas, porque são semelhantes às correspondentes evoluções a partir do estado do tipo produto direto com muitas interfaces. A diferença é que as evoluções a partir da mencionada superposição apresentam oscilações com amplitudes um pouco maiores.

A superposição de produtos diretos do tipo parede (4.38) apresenta evoluções de R e F semelhantes às correspondentes evoluções a partir do estado produto direto do tipo parede. Entre as diferenças, destaca-se o surgimento de reconstruções parciais bem definidas. Como exemplo serão comparados os sistemas com 10 e 14 sítios, Figura 4.30. As razões entre as dimensões dos espaços de estados acessíveis à evolução do estado definido pelas superposições e entre os tempos transcorridos até a primeira reconstrução parcial

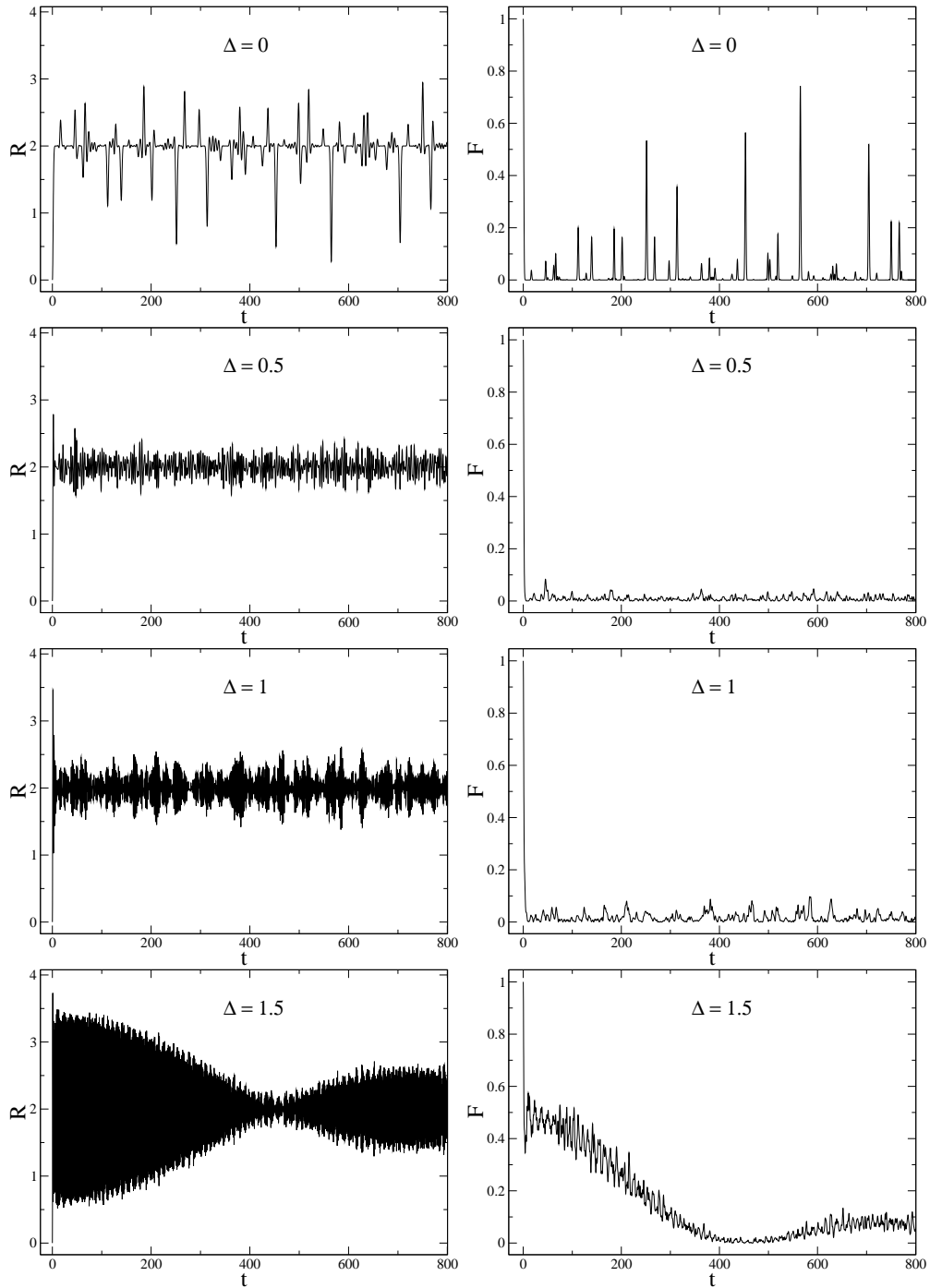


Figura 4.29: R vs t e F vs t . $J^{(1)} = 1$, $N = 14$, $\Delta = 0, 0.5, 1, 1.5$. Estado inicial, do tipo parede $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow_7 \downarrow\downarrow \dots \downarrow_{14}\rangle$, subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . R : coluna da esquerda, F : coluna da direita. Esta Figura deve ser comparada com a Figura 4.7. O tempo t está em unidades arbitrárias.

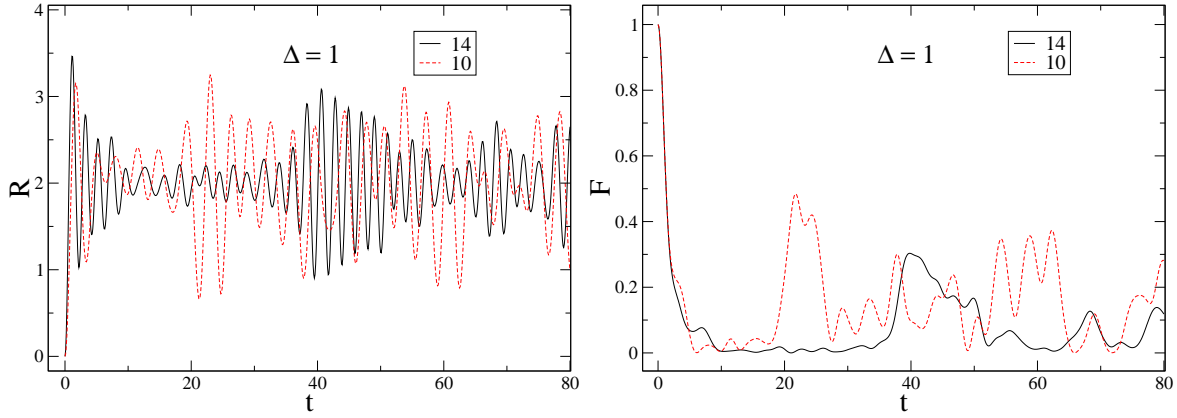


Figura 4.30: R vs t e F vs t . $J^{(1)} = 1$, $\Delta = 1$, $N = 10, 14$. Estados iniciais, superposições de produtos diretos do tipo parede (4.38), contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . Dimensões dos subespaços de estados acessíveis à evolução temporal, $\text{Dim}_{N=10} = 27$, $\text{Dim}_{N=14} = 212$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) R , (b) F .

são,

$$\frac{\text{Dim}_{N=14}}{\text{Dim}_{N=10}} = \frac{212}{27} \simeq 7.9 > \frac{t_r(N=14)}{t_r(N=10)} \simeq 1.8 \geq \frac{14}{10} = 1.4. \quad (4.60)$$

Nesse caso t_r é proporcional a N ao invés da dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução temporal. Trata-se da mesma tendência verificada nos subespaços de uma e duas ondas, a qual é diferente do comportamento dos estados com muitas interfaces enunciado na página 118.

Diferentes formas dos estados

A Tabela 4.4 indica porque o estado com muitas interfaces não exibe reconstruções parciais evidentes, Figura 4.28, e a superposição de estados do tipo parede apresenta reconstruções bastante evidentes, Figura 4.30. No primeiro caso, por exemplo para $\Delta = 1$, a dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução temporal do estado inicial é 3423, e no segundo caso é muito menor, 212. Este último número é comparável com a dimensão do subespaço de uma onda de spin, quando o número de sítios é 240, Figura 4.25.

Há também que se discernir porque para $\Delta = 1.5$ o estado com muitas interfaces relaxa rapidamente, Figura 4.28, e o estado do tipo parede relaxa lentamente, Figura 4.29. Tal diferença decorre de dois fatores, já mencionados na página 93. Primeiro, o Hamiltoniano XXZ acopla diretamente o estado caracterizado por muitas interfaces com maior número de estados que os estados do tipo parede. O Hamiltoniano XXZ acopla estados através dos giros de pares de spins vizinhos antiparalelos, $\uparrow\downarrow \leftrightarrow \downarrow\uparrow$. Segundo, na interação de troca XXZ, quando $\Delta > 1$ as componentes longitudinais z do spin são mais fortes que as componentes transversais. As componentes longitudinais tendem a evitar os giros dos spins, enquanto as transversais

promovem os giros. Entende-se então que os estados do tipo parede demorem mais para relaxar que os estados com muitas interfaces, quando $\Delta = 1.5$, porque o Hamiltoniano XXZ somente gera dinâmica nas interfaces entre spins para cima e para baixo e porque a dinâmica é inibida quando as componentes longitudinais são mais fortes que as transversais.

novamente $\Delta = 0$

A Tabela 4.4 mostra que os números de estados acessíveis às evoluções dos estados iniciais analisados, quando a dinâmica é gerada pelo Hamiltoniano planar XX, são comparáveis com os correspondentes números de estados quando a dinâmica é gerada pelo Hamiltoniano XXZ, com $\Delta \neq 0$. Como essa constatação é compatível com a não relaxação no sistema de 14 sítios gerada pelo Hamiltoniano planar XX, e com a conjectura enunciada, segundo a qual quanto maior a dimensão do espaço de estados acessíveis ao estado inicial, mais rápida será a relaxação do sistema?

Mais uma vez será repetido o que já havia sido dito sobre o Hamiltoniano planar. O fato de haver um Hamiltoniano fermiônico equivalente à forma de um Hamiltoniano de partículas independentes, cujo espaço de estados tem dimensão N , igual ao número de sítios do sistema, deve efetivamente desacoplar o estado inicial em fatores contidos em subespaços de dimensão N . A evolução de cada fator do estado inicial será desacoplada das evoluções dos demais fatores e ocorrerá em um subespaço pequeno.

Capítulo 5

Emaranhamento

Será calculada a evolução temporal de grandezas associadas ao emaranhamento de estados quânticos puros de cadeias de spins. Estados descritos por mistura não serão analisados. As grandezas tratadas são facilmente calculadas para sistemas com grande número de sítios, se a dinâmica estiver restrita ao subespaço de uma onda de spin. A primeira grandeza tratada é a soma das concorrências de todos os pares de sítios da cadeia. A soma das concorrências não é usualmente considerada como uma *medida* quantificadora de emaranhamento. Porém, fornece uma indicação do emaranhamento em todo o sistema. A segunda grandeza é o emaranhamento global definido na referência [19]. A terceira é a medida de emaranhamento definida na referência [20]. As grandezas associadas ao emaranhamento serão comparadas entre si e com a chamada localização, além da recorrência e da fidelidade, seção 4.6. O Hamiltoniano tratado é o Heisenberg XXZ o qual comporta-se como o Hamiltoniano planar XX, para todas as grandezas analisadas com exceção da recorrência, quando a dinâmica está contida no subespaço de uma onda de spin e quando há condições de contorno periódicas. Partindo-se de um estado inicial não emaranhado, o emaranhamento aumenta até atingir, em cadeias suficientemente grandes, um patamar de saturação. Isso mostra que a dinâmica de um Hamiltoniano de spin pode gerar emaranhamento a partir de um estado não emaranhado.¹

Definição

Emaranhamento é uma quantidade definida na mecânica quântica, que descreve correlações sem análogo na mecânica clássica. Define-se emaranhamento de um estado quântico a partir de relações entre suas *partes*. A quantidade de partes e a definição do que seja cada uma delas em um sistema de muitas partículas são arbitrárias, de maneira que o estudo do emaranhamento ainda é um problema

¹O Hamiltoniano XXZ não gera emaranhamento a partir do estado ferromagnético $|F\rangle = |\uparrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle$, o qual é um autoestado particular não emaranhado, e que está fora do subespaço de uma onda de spin.

aberto. Para estados quânticos puros segue a definição. Um estado $|\psi\rangle$ em um espaço de Hilbert,

$$\mathbf{H} = \otimes_{i=1}^{N_P} \mathbf{H}_i, \quad (5.1)$$

é dito separável com respeito aos N_P espaços fatores \mathbf{H}_i , quando ele pode ser fatorado como,

$$|\psi\rangle = \otimes_{i=1}^{N_P} |\psi_i\rangle, \quad |\psi_i\rangle \in \mathbf{H}_i. \quad (5.2)$$

As partes em relação às quais se calcula o emaranhamento são definidas pelos subespaços \mathbf{H}_i . Um estado quântico emaranhado em relação a certas partes é aquele que não é separável em relação àquelas mesmas partes. Exemplos de estados emaranhados para um sistema de dois spins $\frac{1}{2}$ são,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle), \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle \pm |\downarrow\downarrow\rangle), \quad (5.3)$$

chamados de estados de Bell, os quais são conhecidos por apresentar emaranhamento máximo entre os dois spins. Exemplos de estados não emaranhados são,

$$|\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\downarrow\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle) = \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle). \quad (5.4)$$

A descrição da decomposição de um espaço de Hilbert depende da base. Se existir uma decomposição de um estado entre os espaços fatores de interesse, não ficará evidente em qualquer base. Por exemplo, o terceiro estado indicado em (5.4), quando escrito na forma do lado direito, não explicita seu caráter separável.

O estudo da quantificação do emaranhamento entre duas partículas de spin $\frac{1}{2}$ já foi feito de maneira completa. Há uma única grandeza a ser quantificada, o chamado *emaranhamento de formação* [21], ou uma grandeza associada a ele através de uma relação biunívoca, a *concorrência*, seção 5.1. Por outro lado, não existe uma única medida para o emaranhamento global de um sistema de muitas partículas. “Quando o número de partículas cresce, o número de medidas independentes de emaranhamento cresce exponencialmente. Uma classificação completa rapidamente torna-se impraticável” [20]. “No caso de um sistema de muitas partículas, um único número fornecendo a quantidade de emaranhamento não é suficiente: foi mostrado que vários ‘tipos de emaranhamento’ devem ser distinguidos, e a quantificação do emaranhamento de tais sistemas quânticos multipartidos é essencialmente um problema aberto” [22].

A dinâmica tratada neste Capítulo e em todo este trabalho de tese, provém de uma evolução unitária *global*. Em contraste com evoluções *locais* atuando isoladamente em cada parte do sistema, as quais nunca podem aumentar o emaranhamento entre aquelas mesmas partes, as evoluções globais podem aumentar ou diminuir o emaranhamento entre as partes. A dinâmica global analisada neste trabalho resulta de ambos, a equação de Schrödinger (3.4) e do Hamiltoniano de spins que envolve todos os sítios da cadeia conjuntamente.

Subespaço de uma onda

Há dois subespaços de uma onda de spin, como foi comentado no início da seção 4.4. Em ambos evoluções dos estados quânticos e das grandezas analisadas neste Capítulo são equivalentes quando não há campos externos. Será utilizada a expressão *subespaço de uma onda*, a qual fará referência indistintamente a qualquer um dos dois subespaços. No subespaço de uma onda há apenas uma base de estados separáveis, a qual é definida pelas coordenadas de cada sítio. A existência de apenas uma base de estados separáveis, nesse caso particular, facilita bastante o cálculo das grandezas analisadas neste Capítulo. Cada *parte* do sistema será escolhida como sendo cada sítio da cadeia de spins.

A evolução de cada coeficiente de um estado inicial puro $|\psi_0\rangle$, na base de estados $|l\rangle$ (4.39) é dada por,

$$b_l(t) = \langle l | \psi(t) \rangle = \sum_{\zeta=1}^N e^{-i E_{\zeta} t} \langle l | \zeta \rangle \langle \zeta | \psi_0 \rangle, \quad \langle \zeta | \psi_0 \rangle = \sum_{l'} b_{l'}(0) \langle \zeta | l' \rangle, \quad (5.5)$$

onde E_{ζ} e $|\zeta\rangle$ são os autovalores e os auto-estados do Hamiltoniano. O Hamiltoniano tratado é o da expressão (2.37). A expressão de $b_l(t)$ foi obtida tomando-se $J^{(1)} = 1$, para o Hamiltoniano (2.37), e $\hbar = 1$. O tempo t está em unidades arbitrárias. Os estados iniciais escolhidos foram o produto direto separável $|l\rangle$ (4.39) e os estados $|W_N\rangle$ (4.40), em particular os estados: $|W_N^{fa}\rangle$, $|W_N^{ic}\rangle$ e $|W_N^m\rangle$, citados na página 99.

A evolução dos coeficientes $b_l(t)$ (5.5) é válida para qualquer estado inicial. Em particular, a partir de um estado separável (4.39) a dinâmica irá gerar emaranhamento após um pequeno intervalo de tempo. Os resultados serão apresentados nas seções seguintes.

5.1 Concorrência

A concorrência está associada à medida do chamado emaranhamento de formação [21]. Trata-se de uma grandeza definida para um sistema bipartido. Em um sistema de spins com mais de dois sítios ela pode ser definida para um par qualquer de sítios. A soma das concorrências de todos os pares de sítios fornece em um certo sentido informação sobre o emaranhamento em toda o sistema. O cálculo da evolução temporal da concorrência restrita ao subespaço de uma onda de spin seguirá as diretrizes desenvolvidas em [23]. O trecho a seguir foi adaptado dessa referência.

Para um sistema com duas partículas a concorrência de um estado puro é definida como,

$$C = \left| \langle \psi | \tilde{\psi} \rangle \right|, \quad (5.6)$$

onde $|\tilde{\psi}\rangle$ é o estado $|\psi\rangle$ invertido temporalmente. Para um sistema de mais de duas partículas, ela é definida entre dois sítios através de,

$$C_{i,j} = \max \{ \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4, 0 \}, \quad (5.7)$$

onde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$ são as raízes quadradas dos autovalores do operador $\rho_{i,j}^C$ associado às variáveis do par de sítios i e j ,

$$\rho_{i,j}^C = \rho_{i,j} (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho_{i,j}^* (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (5.8)$$

onde $\rho_{i,j}$ é o operador densidade reduzido às variáveis do par de sítios i e j , escrito na base de auto-estados de S^z .

O valor mínimo possível da concorrência é nulo para estados não emaranhados, por exemplo (5.4), e atinge o máximo de uma unidade, para estados maximamente emaranhados como (5.3).

Para o subespaço de uma onda de spin, a concorrência reduz-se a uma forma muito simples, em termos dos coeficientes do estado na base de produtos diretos,

$$C_{i,j}(t) = 2 |b_i(t)b_j(t)|. \quad (5.9)$$

Um estado inicial não emaranhado (4.39) apresenta nulas as concorrências entre todos os pares de sítios. Um estado $|W_N\rangle$ (4.40) apresenta as concorrências, entre quaisquer pares de sítios, iguais a $\frac{2}{N}$, independentemente de quais sejam suas fases θ_l . O valor $\frac{2}{N}$ corresponde à máxima concorrência entre dois sítios de um estado no subespaço de uma onda.

Na referência [23] a evolução temporal da concorrência foi calculada para sistemas com até seis sítios. Seguindo a mesma abordagem, neste trabalho foram tratados sistemas maiores, com 120 e 1200 sítios, introduziram-se interações entre segundos vizinhos e foram testados os estados iniciais como $|W_N\rangle$ (4.40).

A soma de todas as concorrências no subespaço de uma onda é,

$$C_T = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N C_{i,j}, \quad C_T = 2 \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N |b_i(t)b_j(t)|. \quad (5.10)$$

E a média das concorrências é,

$$\overline{C} = \frac{2}{N(N-1)} C_T. \quad (5.11)$$

5.2 Emaranhamento Global - Wei

O emaranhamento global aqui referido consiste em uma proposta [19] de caracterização efetivamente global do emaranhamento de um estado puro. O trecho a seguir foi adaptado dessa referência.

Considera-se um estado puro normalizado geral de N partes $|\psi\rangle$. Esse esquema para análise do emaranhamento considera quão bem um estado emaranhado pode ser aproximado por algum estado não emaranhado $|\phi\rangle$. A proximidade de $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ pode ser avaliada pela sua superposição. O emaranhamento de $|\psi\rangle$ é revelado pela máxima superposição,

$$\Lambda_{\max}(\psi) \equiv \max_{\phi} |\langle \phi | \psi \rangle|, \quad (5.12)$$

quanto maior for $\Lambda_{\max}(\psi)$, menos emaranhado será $|\psi\rangle$. Para um estado produto, $\Lambda_{\max}(\psi)$ é um. Se o estado emaranhado consiste em dois subsistemas separados, $\Lambda_{\max}(\psi)$ é o produto das superposições máximas de cada um. Portanto, faz sentido quantificar-se o emaranhamento de $|\psi\rangle$ através da seguinte quantidade extensiva,

$$E_{\log_2}(\psi) \equiv -\log_2 \Lambda_{\max}^2(\psi), \quad (5.13)$$

a qual normaliza em uma unidade o emaranhamento dos estados EPR-Bell e dos estados GHZ de N partes, e fornece zero para estados não emaranhados. A fim de caracterizarem-se propriedades de pontos críticos quânticos, definiu-se a densidade de emaranhamento ε_N , ou emaranhamento por partícula,

$$\varepsilon_N \equiv N^{-1} E_{\log_2}(\psi). \quad (5.14)$$

No subespaço de uma onda de spin obtém-se muito facilmente o valor de ε_N . $\Lambda_{\max}(\psi)$ é simplesmente o maior entre os módulos dos coeficientes do estado $|\psi\rangle$ na base dos produtos diretos dos auto-estados de S^z . Isso decorre do fato de o subespaço de uma onda ter uma única base constituída de estados separáveis, com cada parte sendo um sítio, os quais são os estados do tipo produto direto (4.39). A expressão de ε_N para um estado $|\psi(t)\rangle$ evoluído temporalmente reduz-se simplesmente a,

$$\varepsilon_N(t) = -N^{-1} \log_2 \left(\max_i |b_i(t)| \right)^2, \quad (5.15)$$

onde os coeficientes $b_i(t)$ são dados por (5.5).

5.3 Medida Q - Meyer e Wallach

A medida de emaranhamento global de Meyer e Wallach, simbolizada² por Q , é uma medida escalável com o número de sítios da cadeia, e também se aplica a estados puros. O trecho a seguir foi adaptado da referência [20].

O espaço de Hilbert $(C^2)^{\otimes N}$ de N qubits tem uma base etiquetada pelas 2^N ‘strings’ de N bits, $|b_1 \cdots b_N\rangle$, $b_j \in \{0, 1\}$. Para $b \in \{0, 1\}$ define-se,

$$\iota_j(b) |b_1 \cdots b_N\rangle = \delta_{bb_j} |b_1 \cdots \hat{b}_j \cdots b_N\rangle, \quad (5.16)$$

onde o símbolo $\hat{}$ denota ausência. Estende-se ι_j por linearidade ao mapa $C^2 \otimes (C^2)^{\otimes N} \rightarrow (C^2)^{\otimes N-1}$. Para $u, v \in (C^2)^{\otimes N-1}$ pode-se escrever $u = \sum u_x |x\rangle$ e $v = \sum v_y |y\rangle$, onde $0 \leq x, y < 2^{N-1}$ são as ‘strings’ de $N-1$ bits. Em seguida seja,

$$D(u, v) = \sum_{x < y} |u_x v_y - u_y v_x|^2, \quad (5.17)$$

²Não confundir a notação Q da medida de Meyer e Wallach com a do número de onda de uma componente espacial de Fourier da magnetização tratada nos Capítulos 3 e 4.

a norma ao quadrado do produto wedge (cunha) de u e v . Finalmente, para $\psi \in (C^2)^{\otimes N}$, define-se

$$Q(\psi(t)) \equiv \frac{4}{N} \sum_{j=1}^N D(\iota_j(0)\psi(t), \iota_j(1)\psi(t)). \quad (5.18)$$

No subespaço de uma onda de spin, a expressão de Q para um estado evoluído temporalmente reduz-se simplesmente a,

$$Q(\psi(t)) = \frac{8}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N |b_i(t)b_j(t)|^2, \quad (5.19)$$

onde N é o número de sítios da cadeia, e os coeficientes $b_i(t)$ são dados por (5.5).

A expressão de Q no subespaço de uma onda de spin assemelha-se à expressão da soma das concorrências no subespaço de uma onda de spin (5.10).

5.4 n -tangle

Outra proposta para se medir emaranhamento global de um sistema de N qubits é chamada de N -tangle [24]. Ela é restrita para N par e $N = 3$. É definida tanto para estados puros como para estados de mistura. Entretanto, para estados no subespaço de uma onda de spin ela é sempre nula, logo não é de interesse neste trabalho. Essa nulidade decorre da definição.

Seja a concorrência generalizada,

$$C_{1\dots N} = \left| \left\langle \psi \left| \tilde{\psi} \right\rangle \right|, \quad (5.20)$$

o N -tangle é definido como o quadrado da concorrência generalizada, para N par,

$$\tau_{1\dots N} = C_{1\dots N}^2. \quad (5.21)$$

Uma vez que o estado invertido temporalmente é obtido através de $|\tilde{\psi}\rangle = \sigma_y^{\otimes N} |\psi^*\rangle$ — quando $|\psi\rangle$ é expresso na base dos auto-estados de σ_z e onde $|\psi^*\rangle$ é $|\psi\rangle$ conjugado — fica evidente que os estados $|\psi\rangle$ e $|\tilde{\psi}\rangle$ são ortogonais, de maneira que a concorrência generalizada é nula para estados contidos no subespaço de uma onda.

5.5 Localização

Com respeito a uma base de produtos diretos

Nos contextos de caos e entropia de informação [25], e de caos e emaranhamento [26], definiu-se uma grandeza que mede a localização de um auto-estado do Hamiltoniano com respeito a uma dada base de estados. Foi tomada como referência a base de estados separáveis, do tipo produto direto de auto-estados

de S_j^z . Aquela grandeza foi chamada de *número de componentes principais* [25], porém, neste trabalho optou-se pela designação de *localização* [26]. Um estado contido no subespaço de uma onda de spin evoluído temporalmente apresenta localização, referente à base dos estados $|l\rangle$ (4.39), expressa por,

$$L(t) = \left(\sum_{i=1}^N |b_i(t)|^4 \right)^{-1}, \quad (5.22)$$

onde os coeficientes $b_i(t)$ são dados por (5.5).

A qualquer estado da base, $|l\rangle$, corresponde o menor valor possível para a localização, $L(t)$, *um*. Trata-se da máxima localização que um estado pode apresentar. Quanto maior o valor da localização, $L(t)$, maior será a delocalização do estado. Deve-se observar que a palavra *localização* neste Capítulo está sendo usada com dois significados: refere-se tanto à grandeza $L(t)$ (5.22), quanto ao fato de poucos estados da base terem peso preponderante na composição do estado considerado. Deve-se enfatizar que a seguinte frase não deve dar motivo para confusão: quanto maior for o valor de $L(t)$ menor será a localização do estado.

Com respeito a uma base de auto-estados

A título de curiosidade calculou-se a localização com respeito a uma entre as possíveis bases de auto-estados. Com respeito a tais bases, a evolução temporal da localização é independente do tempo, para qualquer estado inicial. A independência com o tempo decorre simplesmente da equação de Schrödinger e do fato de o Hamiltoniano ser Hermitiano. Uma vez que as energias E_ζ são números reais, as fases $e^{-iE_\zeta t}$ não afetam o valor da localização.

$$b_\zeta(t) = \langle \zeta | \psi(t) \rangle = e^{-iE_\zeta t} \langle \zeta | \psi_0 \rangle, \quad \langle \zeta | \psi_0 \rangle = \sum_{l'} b_{l'} \langle \zeta | l' \rangle, \quad (5.23)$$

$$L^{(a)}(t) = \left(\sum_{\zeta=1}^N |b_\zeta(t)|^4 \right)^{-1} = \left(\sum_{\zeta=1}^N |\langle \zeta | \psi_0 \rangle|^4 \right)^{-1}. \quad (5.24)$$

A escolha da base de auto-estados não é única quando há degenerescências. O Hamiltoniano XXZ com simetria de translação apresenta dubletos no subespaço de uma onda de spin. A Tabela 5.1 mostra valores da localização com respeito a uma base de auto-estados para diferentes estados iniciais. Assim como no caso da localização com respeito a base de produtos diretos, verifica-se que o menor valor possível para a localização com respeito a base dos auto-estados é *um* e corresponde a qualquer estado da base. Trata-se da máxima localização. Quanto maior o valor da localização $L^{(a)}(t)$, maior é a delocalização.

Uma diferença importante entre as duas definições de localização está no fato de que os estados de máxima e mínima localização são os estados do tipo produto direto e os auto-estados para uma definição, e o contrário para a outra.

Tabela 5.1: Localização com respeito a uma base de auto-estados. $N = 120$.

A base dos auto-estados foi gerada numericamente. Cada auto-estado foi expresso na base dos produtos diretos. Todos os coeficientes envolvidos são reais. $|\zeta = 5\rangle$ é um dos auto-estados da base utilizada, trata-se do quinto auto-estado em ordem crescente de energia.

$ l = 1\rangle$	0.80674361E+02	$ \text{Pe}_{120}^{12}\rangle$	0.77832040E+01
$ W_N^{fa}\rangle$	0.64864750E+02	$ W_N^{ic}\rangle$	0.53182895E+01
$ \text{Pa}_{120}^3\rangle$	0.39029243E+02	$ W_{120}^5\rangle$	0.19999999E+01 auto-estado
$ \text{Pa}_{120}^{12}\rangle$	0.11084440E+02	$ \zeta = 5\rangle$	0.99999999E+00 auto-estado

5.6 Dois Regimes

Os coeficientes $b_l(t)$, (5.5), g de um estado evoluído a partir de um estado inicial do tipo produto direto (4.39) são caracterizados por dois regimes, apesar de a evolução temporal de cada coeficiente $b_l(t)$ ter uma única forma (5.5) em relação ao tempo. Esses dois regimes são evidenciados pela evolução temporal do módulo do coeficiente, $|b_l(t)|$, de um sítio afastado do spin inicialmente girado, por exemplo o mais afastado. Seja o estado inicial $|1\rangle$, havendo condições de contorno periódicas o sítio mais afastado é $l = \frac{N}{2} + 1$. Observam-se também os dois regimes para as concorrências $C_{\frac{N}{2}, \frac{N}{2}+1}(t)$ e $C_{1, \frac{N}{2}+1}(t)$, (5.9), e para a magnetização do sítio situado no meio da cadeia $\langle S_{j=\frac{N}{2}+1}^z \rangle_t$, (3.9), Figura 5.1. No regime inicial, os valores de $|b_{\frac{N}{2}+1}(t)|$, $C_{\frac{N}{2}, \frac{N}{2}+1}(t)$, $C_{1, \frac{N}{2}+1}(t)$ e $\langle S_{j=\frac{N}{2}+1}^z \rangle_t$ permanecem próximos aos seus valores iniciais 0, 0, 0, $+\frac{1}{2}$, respectivamente, durante certo tempo. Segue-se outro regime onde esses valores afastam-se do valor inicial, sofrem oscilações e tendem a relaxar para o valor inicial. A relaxação completa é interrompida porque o sistema finito não tem infinitos graus de liberdade.

Embora a expressão (5.5) indique que um coeficiente como $b_{\frac{N}{2}+1}(t)$ seja não nulo logo após $t = 0$, ele é quase nulo até que a perturbação inicial, caracterizada por apenas um spin girado, se propague pela cadeia através das interações de troca entre os spins vizinhos. Do ponto de vista dinâmico acontecem duas coisas. No regime inicial a dinâmica global da equação de Schrödinger atua instantaneamente em todo o sistema. No regime seguinte, a propagação da excitação ao longo da cadeia atua progressivamente nos sítios distantes do sítio com spin girado inicialmente.

Comportamentos de $|b_{60}(t)|$ vs t e $|b_{61}(t)|$ vs t

Para uma cadeia com condições de contorno periódicas, com 120 sítios, e para o estado inicial $|1\rangle$, foram comparados os módulos $|b_{60}(t)|$, $|b_{61}(t)|$ e $|b_{62}(t)|$. Como esperado por causa das condições de contorno periódicas, $|b_{60}(t)| = |b_{62}(t)|$. Entretanto, $|b_{61}(t)|$ atinge seu primeiro pico antes que $|b_{60}(t)|$, o que parece contra intuitivo, pois o sítio 61 está mais distante do sítio 1 que os sítios 60 e 62. Além disso o primeiro pico de $|b_{61}(t)|$ é mais pronunciado que o primeiro pico de $|b_{60}(t)|$, Figura 5.1. O resultado não

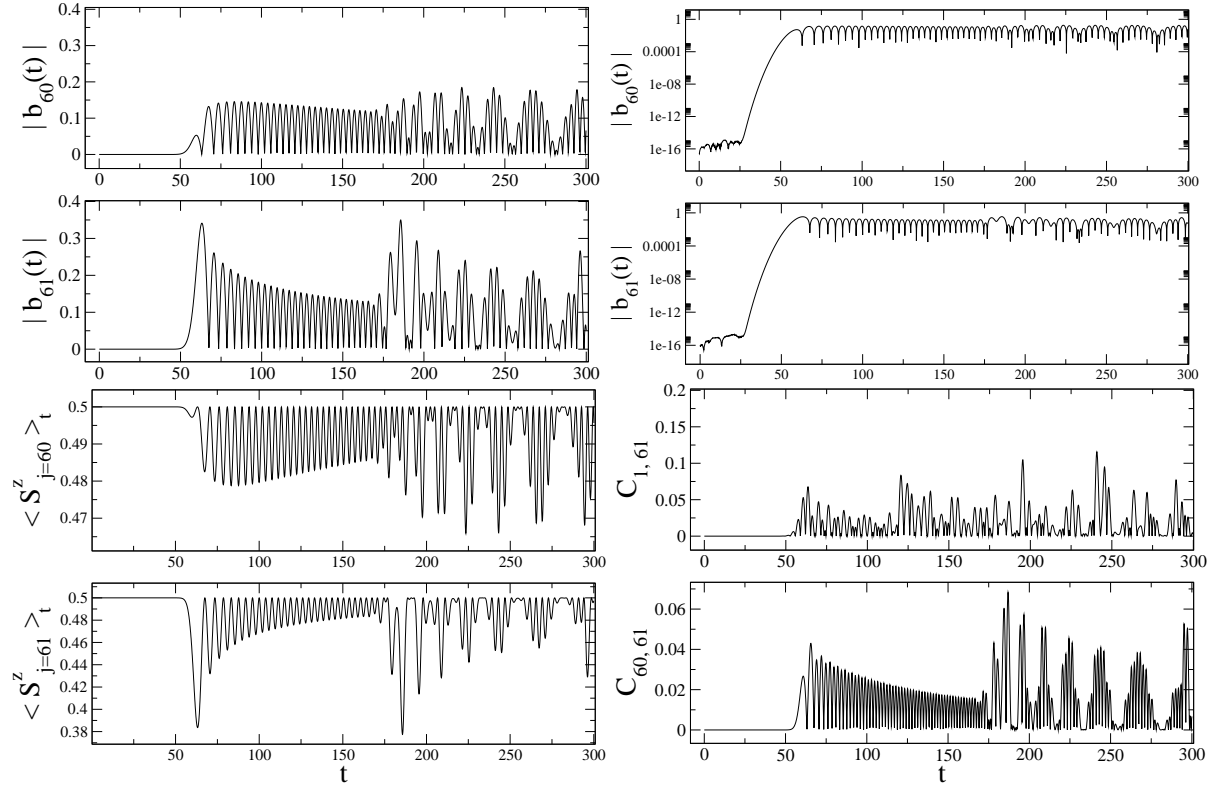


Figura 5.1: Propagação de um ‘sinal’ no subespaço de uma onda. $N = 120$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). $|b_{60}(t)|$ vs t , $|b_{61}(t)|$ vs t , $\langle S^z_{j=60} \rangle_t$ vs t , $\langle S^z_{j=61} \rangle_t$ vs t , $C_{1,61}$ vs t , $C_{60,61}$ vs t . $b_j(t)$ (5.5), $\langle S^z_j \rangle_t$ (3.9), $C_{i,j}$ (5.9). Nos gráficos feitos com a escala logarítmica há uma faixa inicial onde os coeficientes estão ao redor de 10^{-16} , o que resulta da precisão numérica do cálculo. Cada função foi calculada em uma sequência discreta de valores da variável $t = n\delta t$, com $\delta t = 0.1$ e $n = 0, 1, 2, \dots$. Nenhum zero de $|b_{60}(t)|$ vs t ou $|b_{61}(t)|$ vs t foi amostrado, pois não há divergências na escala logarítmica. O tempo t está em unidades arbitrárias.

é absurdo pois o sítio 61 sente os dois sinais associados à propagação da perturbação inicial, um viajando em cada ramo da cadeia, chegando ao mesmo tempo, enquanto o sítio 60 sente um sinal atrasado em relação ao outro. Possivelmente no caso do sítio 61 há um efeito de interferência construtiva mais intenso que no caso do sítio 60.

5.7 Resultados e Comparações

As evoluções temporais, a partir de um estado inicial separável, das três grandezas associadas ao emaranhamento global C_T (5.10) ou \overline{C} (5.11), $E_{\log_2}(\psi)$ (5.13) ou ε_N (5.14), Q (5.18), além da localização L (5.22), da recorrência R (4.55) e da fidelidade F (4.56) serão comparadas entre si e para cadeias com

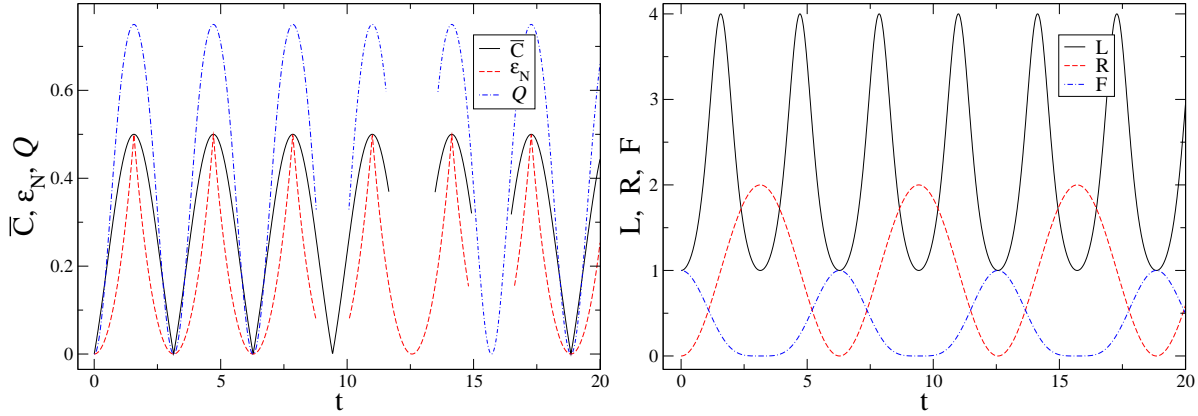


Figura 5.2: Sistema pequeno. Dinâmicas reversíveis e periódicas. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). $N = 4$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) \overline{C} vs t . ε_N vs t . Q vs t . (b) R vs t . F vs t . L vs t .

diferentes números de sítios. Essas grandezas exibem características comuns e distintas.

Implementou-se o cálculo de todas as grandezas para o Hamiltoniano XXZ. Entretanto, C_T , $E_{\log_2}(\psi)$, Q , L e F são independentes do parâmetro de anisotropia Δ . Apenas R é dependente da anisotropia da troca. A independência das evoluções temporais mencionadas em relação a Δ ocorre quando a dinâmica está contida no subespaço de uma onda de spin e quando há condições de contorno periódicas.

Como foi mencionado na seção 4.4, (4.44), no subespaço de uma onda, os auto-estados do Hamiltoniano XXZ não dependem de Δ e todos os autovalores sofrem o mesmo deslocamento ao variar-se Δ . Então os módulos $|b_l(t)|$ dos coeficientes (5.5) também são invariantes com Δ ,

$$|b_l(t, \Delta)| = \left| e^{-i c t e(\Delta) t} \sum_{\zeta=1}^N e^{-i E_{\zeta} t} \langle l | \zeta \rangle \langle \zeta | \psi_0 \rangle \right| = |b_l(t)|. \quad (5.25)$$

As grandezas C_T , $E_{\log_2}(\psi)$, Q , L dependem de $|b_l(t)|$. A independência de F (4.56) em relação a Δ é notada a partir de considerações análogas àsquelas feitas para os módulos dos coeficientes $|b_l(t)|$,

$$F(t, \Delta) = \left| e^{\pm c t e(\Delta) t} \sum_{\zeta} |\langle \zeta | \psi_0 \rangle|^2 e^{\pm i E_{\zeta} t} \right|^2 = F(t). \quad (5.26)$$

A dependência de R em relação a Δ , através dos autovalores, fica evidente a partir de (4.55).

5.7.1 Sistemas pequenos

Tomando-se como estado inicial um estado separável $|l\rangle$ (4.39), em sistemas pequenos, $N = 4$ ou 6, todas as grandezas analisadas apresentam dinâmicas reversíveis caracterizadas por oscilações com frequências Rabi, Figura 5.2. As evoluções de R e F mostram que o estado inicial é reconstruído periodicamente, quando essas grandezas atingem respectivamente os valores 0 e 1.

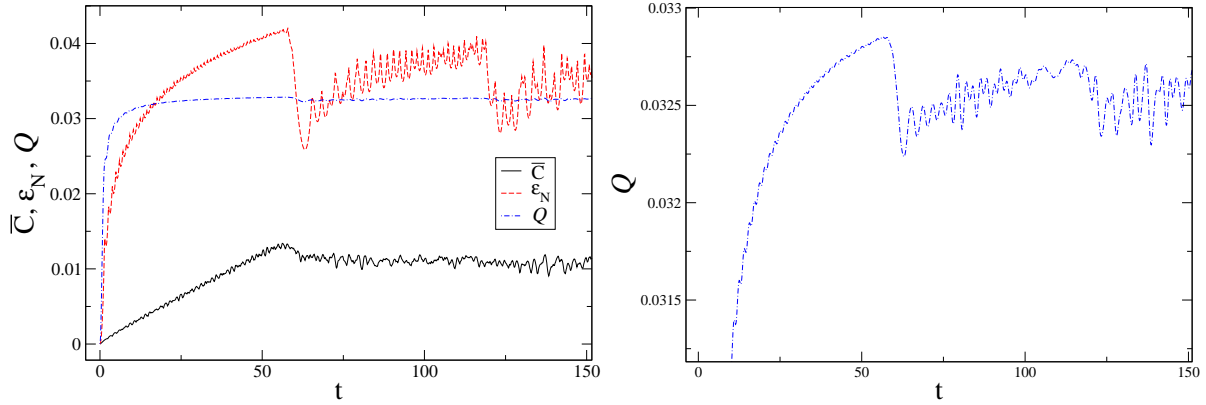


Figura 5.3: Saturação das grandezas de emaranhamento em uma cadeia suficientemente grande. $N = 120$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) \overline{C} vs t , ε_N vs t , Q vs t . (b) Q vs t , detalhe.

5.7.2 Patamar de Saturação

Tomando-se por estado inicial um estado separável $|l\rangle$ (4.39), as evoluções das grandezas C_T ou \overline{C} , $E_{\log_2}(\psi)$ ou ε_N e Q , em sistemas grandes, crescem desde o valor *zero*, correspondente a ausência de emaranhamento, até um máximo alcançado aproximadamente no mesmo instante pelas três grandezas. Cada máximo é seguido por um pequeno decréscimo e então cada grandeza estabiliza-se em um patamar de saturação. Pequenas flutuações aparecem em toda a dinâmica, Figura 5.3 (a). O instante onde o patamar é atingido coincide com o primeiro pico dos valores de $|b_j(t)|$, $\langle S_j^z \rangle_t$ e $C_{j-1,j}$, sendo que j indica o sítio mais distante do spin girado do estado inicial: se o spin girado inicialmente estiver no sítio 1, então $j = \frac{N}{2} + 1$ na cadeia com condições de contorno periódicas, Figura 5.1, e $j = N$ na cadeia com extremidades livres. O patamar de saturação da média das concorrências é um pouco inferior à concorrência máxima $\frac{2}{N}$ entre dois sítios de um estado contido no subespaço de uma onda. O patamar de saturação é atingido quando a perturbação caracterizada pelo spin girado do estado inicial percorre toda a cadeia, o que gera emaranhamento entre todos os sítios.

A densidade de emaranhamento global ε_N apresenta o decréscimo mais pronunciado e nítido do que \overline{C} e Q . Esse decréscimo nítido possivelmente tem sua origem em efeitos de interferência, associados a um incremento no coeficiente de uma componente do estado evoluído temporalmente. O decréscimo apresentado por Q do máximo até o patamar de saturação é menor que os correspondentes decréscimos das demais grandezas. Embora pequeno, o decréscimo é nítido quando se estica a escala suficientemente Figura 5.3 (b).

Direcionamento a um subespaço ortogonal

A dinâmica leva o sistema a percorrer estados ortogonais ou quase ortogonais ao estado inicial quando a cadeia é suficientemente grande, por exemplo com 60 sítios. A informação sobre a ortogonalidade entre os estados inicial e evoluído temporalmente pode ser obtida através da recorrência R (4.52), a qual mede o quadrado do módulo da diferença entre os dois estados, e da fidelidade F (4.53), a qual está diretamente ligada ao produto escalar entre os estados. A tendência de o estado evoluído temporalmente tender, ainda que com oscilações, a um subespaço ortogonal ao estado inicial é interrompida por reconstruções parciais das grandezas R e F , Figura 4.25. As reconstruções parciais são características dos sistemas finitos. Porém, apesar de haver reconstruções parciais, o estado evoluído temporalmente não irá se afastar muito do espaço ortogonal ao estado inicial.

A tendência de o sistema direcionar-se a um subespaço ortogonal ao estado inicial é análoga à tendência de relaxação da magnetização analisada nos Capítulos 3 e 4, em particular na seção 4.4, onde analisou-se a relaxação no subespaço de uma onda de spin. Entretanto, no caso da magnetização há um tempo de reconstrução parcial para cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t$. Tais tempos dependem do número de onda Q .

5.7.3 Coincidências entre as evoluções de sistemas com números de sítios diferentes

As evoluções temporais de cada uma das grandezas — soma de todas concorrências C_T (5.10), medida de emaranhamento de Wei $E_{\log_2}(\psi)$ (5.13), medida de Meyer e Wallach multiplicada por N , NQ (5.18), localização L (5.22), recorrência R (4.52) e fidelidade F (4.53) — foram comparadas em sistemas com números de sítios diferentes e a partir de estados iniciais separáveis do tipo $|1\rangle$ (4.39). Há coincidências entre as correspondentes evoluções temporais de C_T , Figura 5.4, $E_{\log_2}(\psi)$, NQ e L , Figura 5.5, a partir do instante inicial até certo instante $t_c(N)$ e entre as evoluções temporais de R e F até certo instante $t_r^{RF10}(N)$, Figura 4.25. Há analogias com as coincidências observadas na magnetização, Figuras 3.4 e 3.6. Não há coincidências para \overline{C} , ε_N ou Q .

5.7.4 Tempos de reconstrução e de saturação

Será definido como tempo de saturação t_s , o tempo transcorrido até as grandezas associadas ao emaranhamento global e a localização atingirem os correspondentes patamares de saturação. Nota-se nas Figuras 5.4 e 5.5 que $t_s(N) \approx t_c(N)$. Para o estado inicial do tipo produto direto, o tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial da recorrência e da fidelidade, t_r^{RF10} , Figura 4.25, é o dobro do tempo de saturação t_s . Além disso, esses tempos têm uma relação especial com o número de sítios da cadeia. Para cadeias com condições de contorno periódicas,

$$t_r^{RF10} \approx 2t_s \approx N. \quad (5.27)$$

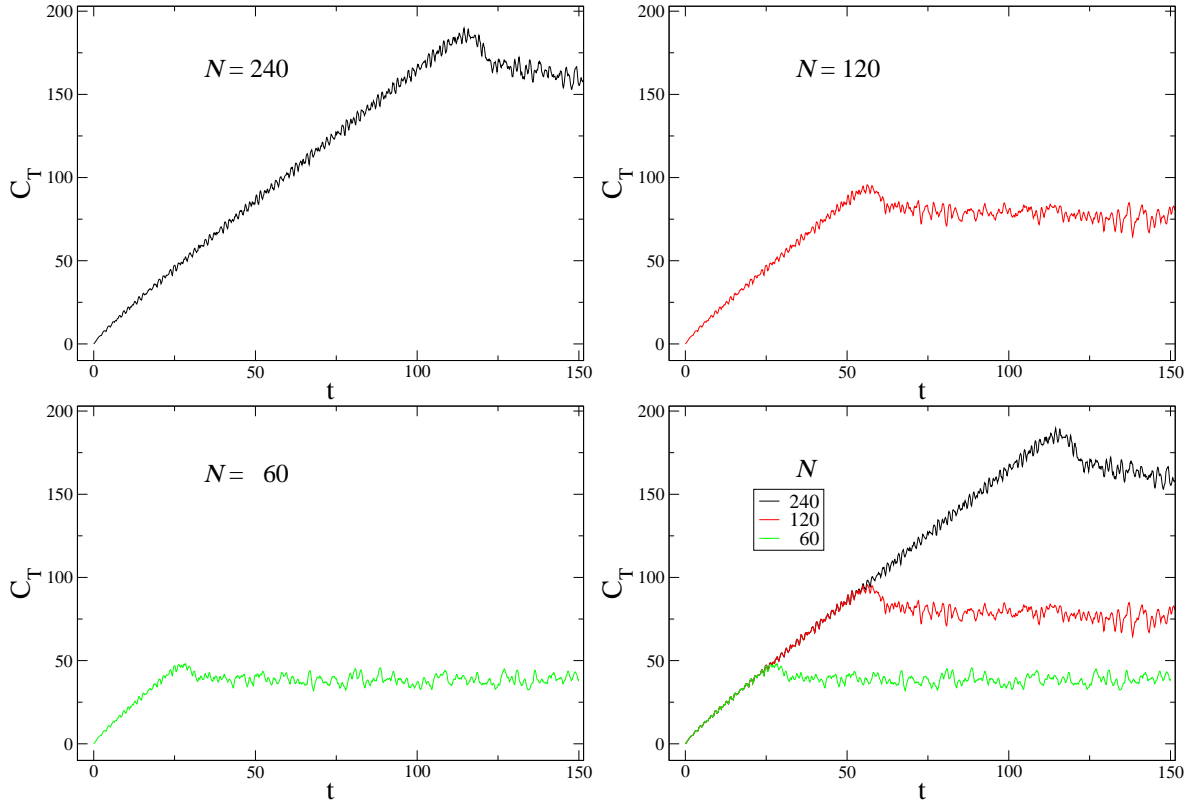


Figura 5.4: Coincidências entre dinâmicas de C_T em sistemas com números de sítios diferentes. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). C_T vs t . $N = 240, 120$ e 60 . Os tempos de saturação e de coincidência são aproximadamente os mesmos $t_s(N) \approx t_c(N)$. O tempo t está em unidades arbitrárias.

Para cadeias com extremidades livres, e onde o spin girado inicialmente esteja localizado em uma das extremidades da cadeia,

$$t_r^{RF10} \approx 2t_s \approx 2N. \quad (5.28)$$

As relações (5.27) podem ser verificadas a partir das Figuras 4.25, 5.4 e 5.5. Os gráficos que mostram a validade de (5.28) não foram exibidos.

A existência do fator *dois* entre os tempos de reconstrução t_r^{RF10} e saturação t_s é entendida da seguinte maneira. A reconstrução parcial da recorrência ou a da fidelidade corresponde a reconstrução parcial do estado inicial, de maneira que t_r^{RF10} é o tempo transcorrido para que a perturbação caracterizada pelo único spin girado do estado inicial vá até o sítio mais distante de tal sítio, e retorne a ele. O tempo de saturação t_s corresponde à criação de emaranhamento entre todos os sítios da cadeia, de maneira que t_s é o tempo transcorrido para que a perturbação inicial atinja o sítio mais distante. Para a cadeia com condições de contorno periódicas, o sítio mais distante do spin girado inicialmente está do ‘meio’ da cadeia, e para a cadeia com extremidades livres, se o spin girado inicialmente estiver em uma das

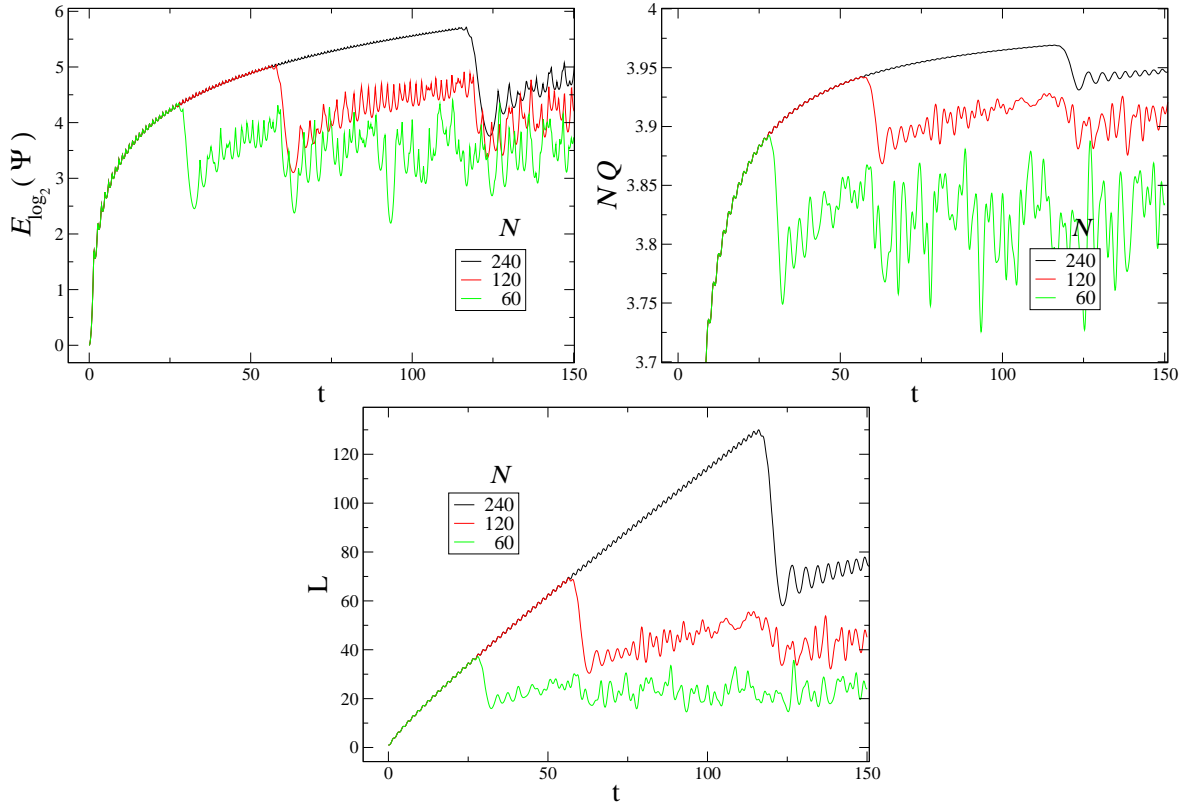


Figura 5.5: Coincidências entre dinâmicas de $E_{\log_2}(\psi)$, NQ , R , F e L em sistemas com números de sítios diferentes. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). $E_{\log_2}(\psi)$ vs t . NQ vs t , detalhe. L vs t , $L(0) = 1$. $N = 240, 120$ e 60 . Os tempos de saturação e de coincidência são aproximadamente os mesmos $t_s(N) \approx t_c(N)$. R vs t e F vs t , estão exibidos na Figura 4.25. O tempo t está em unidades arbitrárias.

extremidades, o sítio mais distante está na outra extremidade.

As relações de dependência de t_r^{RF10} e t_s com N são uma forma mais restrita que a dependência do tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial da magnetização, a qual também é linear com N (3.42).

5.7.5 Localização e Emaranhamento

Os resultados obtidos para a dinâmica no subespaço de uma onda de spin mostram que $L(t)$, (5.22), tem comportamento análogo ao das grandezas que quantificam o emaranhamento global. Crescem e saturam ao mesmo tempo. Esses resultados mostram que o menor grau de emaranhamento está ligado à localização, e o maior grau de emaranhamento, a saturação, está ligado à delocalização. Entretanto, essas correspondências entre o emaranhamento e a localização decorrem de uma particularidade do subespaço de uma onda de spin, pois fora desse subespaço há estados pouco emaranhados que são delocalizados.

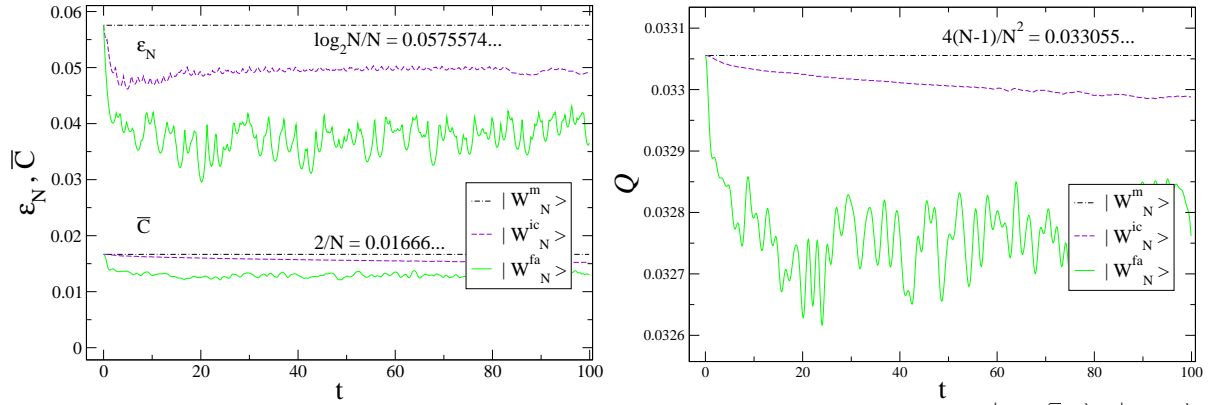


Figura 5.6: Estados iniciais do tipo $|W_N\rangle$ (4.40): um auto-estado $|W_{120}^5\rangle$, $|W_N^{ic}\rangle = |W_N^{\sqrt{2}/3}\rangle$, $|W_N^{fa}\rangle$. $N = 120$. O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) \bar{C} vs t , ε_N vs t . (b) Q vs t .

No subespaço de uma onda todos os estados separáveis apresentam máxima localização, e vice-versa. Por outro lado, no espaço de estados completo de N spins $\frac{1}{2}$ cuja dimensão é 2^N , há infinitas escolhas possíveis de bases de estados separáveis. Um estado separável de uma base, o qual é não emaranhado, pode ser altamente delocalizado em outra base, onde será expresso por uma combinação de 2^N estados separáveis daquela outra base.

5.7.6 Estados $|W_N\rangle$

Nesta seção serão mostrados os resultados referentes aos estados iniciais $|W_N\rangle$ (4.40), Figura 5.6. Quando as fases $\theta_l = 2\pi l\beta/N$ são definidas por β inteiro, caso de um auto-estado do Hamiltoniano $|W_N^m\rangle$, a dinâmica é trivial: \bar{C} , ε_N e Q são constantes no tempo e são iguais aos valores máximos $\frac{2}{N}$, $\frac{1}{N}\log_2 N$ e $\frac{4(N-1)}{N^2}$, respectivamente. Para um estado $|W_N^{fa}\rangle$ caracterizado por fases θ_l aleatórias, \bar{C} , ε_N e Q sofrem quedas abruptas em tempos curtos a partir dos valores máximos, e estabilizam-se com pequenas flutuações ao redor de patamares de saturação. Esses patamares são aproximadamente coincidentes com os patamares atingidos quando o estado inicial é um produto direto, Figura 5.3. Para um estado $|W_N^{ic}\rangle$ caracterizado por fases θ_l definidas por β irracional, por exemplo $\beta = \sqrt{2}$, as evoluções de \bar{C} , ε_N e Q seguem curvas intermediárias entre as curvas definidas a partir de $|W_N^m\rangle$ e $|W_N^{fa}\rangle$. Se o estado inicial for um auto-estado escrito apenas em termos de coeficientes reais, o qual não é um estado do tipo $|W_N\rangle$, as evoluções de \bar{C} , ε_N e Q , não mostradas na Figura 5.6, flutuam ao redor dos patamares de saturação deste $t = 0$.

5.8 Segundos Vizinhos

5.8.1 Recorrência e Fidelidade

Cálculos da recorrência e da fidelidade a partir de um estado do tipo produto direto, $|l\rangle$, para diversos valores do parâmetro de acoplamento entre segundos vizinhos $J^{(2)}$, indicam que o estado evoluído no tempo tende a um subespaço ortogonal ao estado inicial, oscilando entre estados ortogonais e quase ortogonais. Há um valor particular $J^{(2)} = J_{nest}^{(2)} = 0.25$ (4.49) para o qual a fidelidade do estado evoluído aproxima-se do valor nulo, mas não o atinge até a sua primeira reconstrução parcial, e a recorrência oscila com amplitudes maiores, Figura 5.7. O valor $J_{nest}^{(2)}$ é aquele que separa os domínios de $J^{(2)}$ para os quais a curva de dispersão da banda de uma onda de spin apresenta *nesting* ou não (4.48).

Os comportamentos da recorrência e da fidelidade para $J^{(2)} = J_{nest}^{(2)}$ decorrem de haver alta densidade de parcelas nas expressões (4.55) e (4.56) onde as frequências, no caso os autovalores E_ζ , das funções oscilatórias variam pouco em um certo domínio do momento k . A curva de dispersão $E_k^{(1,2)}$ vs k , (2.40), para $J^{(2)} = J_{nest}^{(2)} = 0.25$ apresenta um patamar aproximadamente constante nas vizinhanças de $k = \pm\pi$, como indica a Figura 4.14. A partir de (2.40) decorre que a derivada de mais baixa ordem não nula nos pontos $k = \pm\pi$ é a derivada quarta,

$$\left. \frac{\partial E_k^{(1,2)}}{\partial k} \right|_{k=\pm\pi} = \left. \frac{\partial^2 E_k^{(1,2)}}{\partial k^2} \right|_{k=\pm\pi} = \left. \frac{\partial^3 E_k^{(1,2)}}{\partial k^3} \right|_{k=\pm\pi} = 0, \quad \left. \frac{\partial^4 E_k^{(1,2)}}{\partial k^4} \right|_{k=\pm\pi} \neq 0. \quad (5.29)$$

Verificou-se numericamente para diversos valores de $J^{(2)} \neq J_{nest}^{(2)}$, que não há nenhum outro valor de k , além dos valores $k = \pm\pi$, para o qual as derivadas primeira e segunda anulam-se simultaneamente.

5.8.2 Emaranhamento e $\langle S_Q^z \rangle_t$

Quando $J^{(2)} > J_{nest}^{(2)}$ (4.49) — condição para haver *nesting* na curva de dispersão da banda de uma onda de spin — as evoluções de ε_N , Q e L apresentam um pequeno decréscimo antes de apresentarem um decréscimo mais acentuado. Por exemplo, a Figura 5.8 mostra o pequeno decréscimo por volta de $t_{s1} \approx 390$ e o decréscimo mais acentuado por volta de $t_{s2} \approx 690$. Não se descobriu porque esse pequeno decréscimo está relacionado à condição $J^{(2)} > J_{nest}^{(2)}$.

O tempo t_{s1} coincide aproximadamente com o tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial, $t_r(Q_{(2c)})$, do modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ associado à criticalidade $Q_{(2c)}$, Tabela 4.7. As Figuras 5.8 e 4.16 indicam $t_{s1} \approx t_r(Q_{(2c)}) \approx 390$.

5.8.3 Reconstruções e Saturação

O que caracterizaria melhor a saturação das grandezas associadas ao emaranhamento, t_{s1} ou t_{s2} ? A evolução de \overline{C} parece indicar que seria t_{s1} , Figura 5.8 (a), enquanto que as evoluções de ε_N , Q e L ,

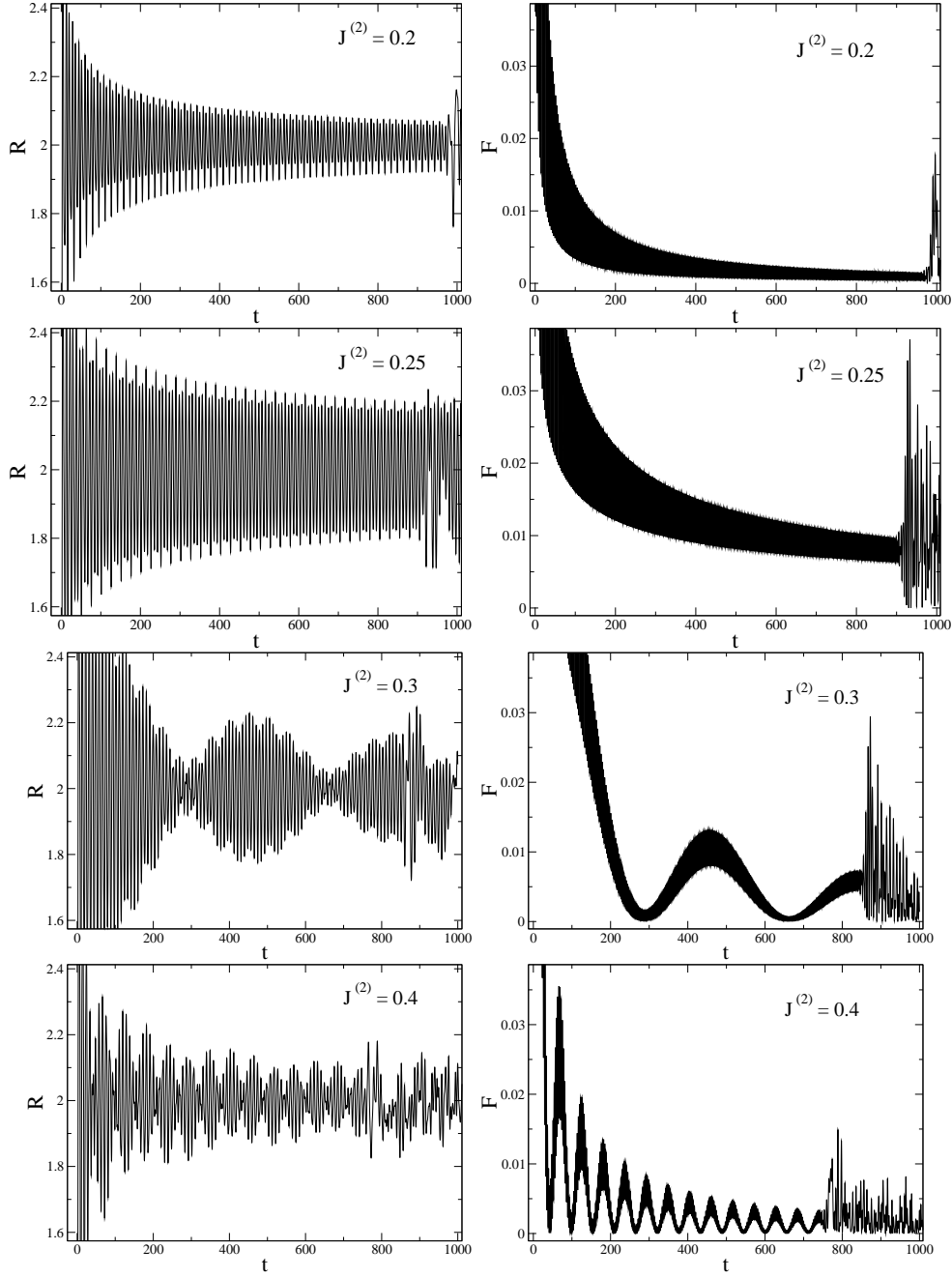


Figura 5.7: $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.2, 0.25, 0.3, 0.4$. $N = 1200$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). Coluna da esquerda: R vs t , detalhes. Coluna da direita: F vs t , detalhes. Há uma certa analogia das curvas da fidelidade com as curvas da magnetização, Figura 4.17. O tempo t está em unidades arbitrárias.

Figura 5.8 (b), (c) e (d), parecem indicar que seria t_{s2} .

Na presença de interações entre segundos vizinhos continua sendo válida uma relação análoga a

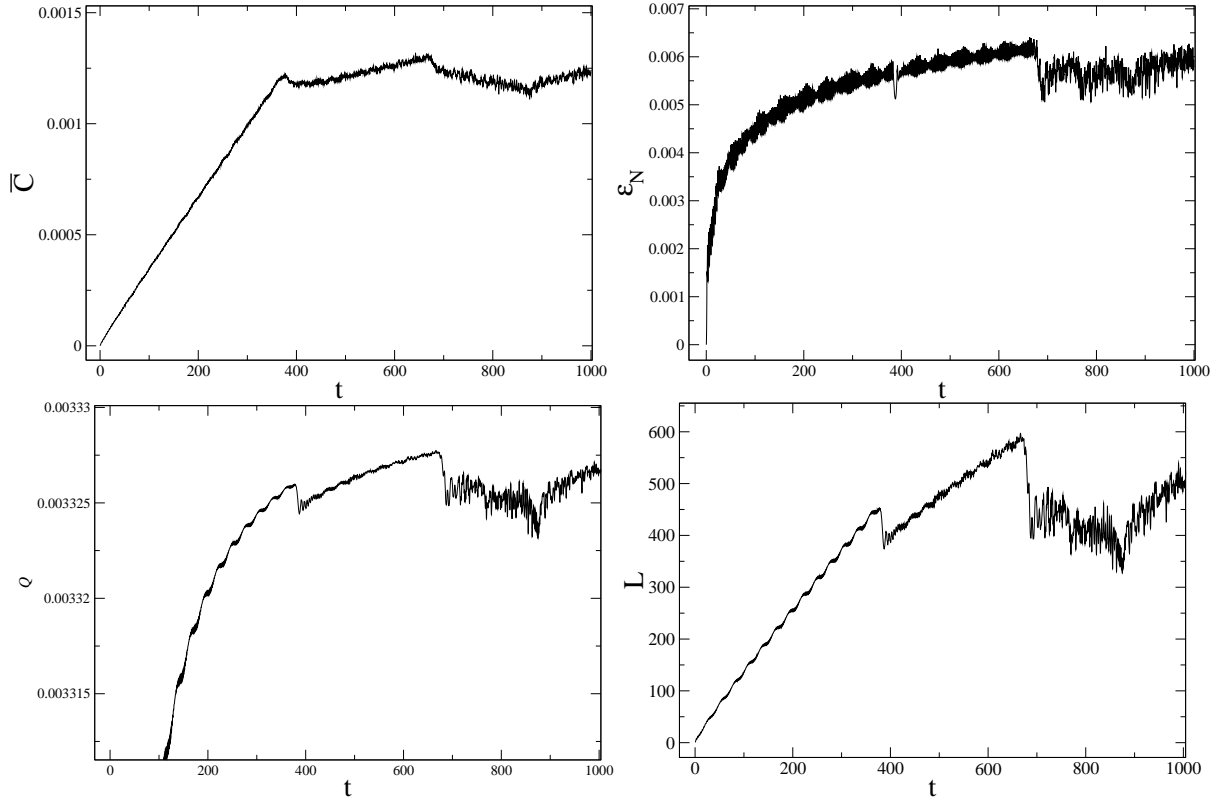


Figura 5.8: Saturação do emaranhamento. $J^{(1)} = 1$, $J^{(2)} = 0.4$, $N = 1200$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) \overline{C} vs t , (b) ε_N vs t , (c) Q vs t , detalhe, (d) L vs t . Observação, $L(0) = 1$.

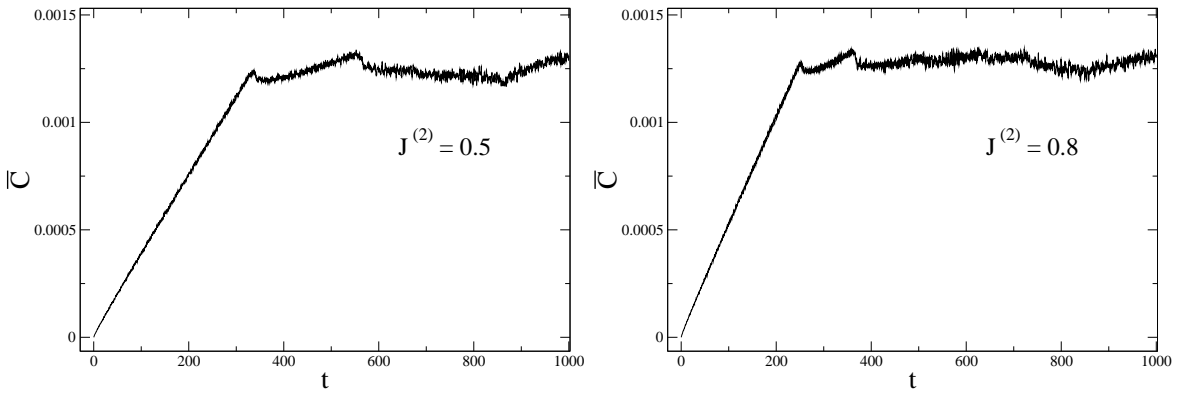


Figura 5.9: Dependência de t_{s1} com $J^{(2)}$. \overline{C} vs t , $J^{(1)} = 1$, $N = 1200$. Estado inicial, $|1\rangle$ (4.39). O tempo t está em unidades arbitrárias. (a) $J^{(2)} = 0.5$, $t_{s1} = 346$, (b) $J^{(2)} = 0.8$, $t_{s1} = 260$. A Figura 5.8 (a) indica $t_{s1} = 390$ para $J^{(2)} = 0.4$.

$t_r^{RF1o} \approx 2t_s$, (5.27), porém envolvendo t_{s1} e cuja dependência com N é diferente de (5.27).

$$t_r^{RF1o} \approx 2t_{s1} \approx aN, \quad a = a(J^{(2)}) < 1. \quad (5.30)$$

Quanto maior o valor da constante de troca $J^{(2)}$, mais rapidamente a perturbação propaga-se pela cadeia, de maneira que os tempos t_r^{RF10} e t_{s1} diminuem bem como a constante a , Figura 5.9. Isso foi verificado para $J^{(2)} = 0.4, 0.5$ e 0.8 .

Capítulo 6

Conclusões

6.1 XY(γ) e XY(h, γ)

No Capítulo 3 foram apresentados os resultados referentes à diagonalização do Hamiltoniano XY(h, γ) (3.13) e à evolução temporal das componentes espaciais de Fourier da magnetização longitudinal, os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ (3.20), a partir do estado inicial $\rho_0(S^z)$ (3.12), para uma cadeia finita de spins $\frac{1}{2}$. Foi apresentada também a relaxação da magnetização, para o Hamiltoniano XY(γ), tomando-se em primeiro lugar o limite de cadeias infinitas, e em seguida, através do método da Fase Estacionária, o limite de tempo infinito. Todos esses cálculos foram desenvolvidos em forma analítica e exata, e estão na dissertação de Tygel [4]. Há dois resultados marcantes para a relaxação da magnetização. O primeiro consiste na evolução temporal de cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t$ caracterizada por oscilações e por um amortecimento com a forma de lei de potência (3.28). O segundo, na criticalidade na lei de potência envolvendo o número de onda Q da modulação espacial e o parâmetro de anisotropia γ do Hamiltoniano XY(γ). Para valores críticos de Q e γ a relaxação torna-se ainda mais lenta, (3.34) e Figura 3.2. Essas duas características são representativas do que ocorre em outras cadeias unidimensionais de spin $\frac{1}{2}$ cujos Hamiltonianos são da família XY [2, 3]. A criticalidade somente foi observada nesses sistemas quando o Hamiltoniano apresenta *nesting* e *gap* no espectro de energia.

Neste trabalho analisaram-se as expressões analíticas dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ em sistemas finitos para ambos Hamiltonianos XY(γ) e XY(h, γ). Os gráficos desses modos em sistemas com mais de 30 ou 60 sítios mostram que há oscilações e amortecimento, o que é condizente com o limite assintótico de cadeia e tempo infinitos. Porém surge uma característica própria dos sistemas finitos ausente nos sistemas infinitos, as reconstruções parciais do valor inicial $\langle S_Q^z \rangle_0$ de cada modo $\langle S_Q^z \rangle_t$, Figura 3.4. Os processos de relaxação ocorrem sem interrupção, indefinidamente, apenas em sistemas infinitos, devido aos infinitos graus de liberdade dos mesmos. As reconstruções parciais são processos de interferência construtiva mais

pronunciados. Elas decorrem do fato de o número de graus de liberdade do sistema ser finito, de maneira que as não homogeneidades da magnetização não podem distribuir-se indefinidamente pela cadeia. As evoluções de modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ com o mesmo número de onda Q em dois sistemas com números de sítios diferentes, para estados iniciais $\rho_0(S^z)$, coincidem até a primeira reconstrução parcial no sistema com menor número de sítios. Esse fato garante que a evolução temporal de um modo em um sistema finito evolui da mesma maneira que no sistema infinito até a sua primeira reconstrução parcial. Em contraste com sistemas grandes, sistemas muito pequenos, com quatro sítios não apresentam nenhuma tendência de relaxação. A partir deles desenvolve-se uma evolução reversível, periódica, Figura 3.5.

Um procedimento numérico, Figura 3.11, foi desenvolvido para a obtenção de envoltórias das expressões analíticas dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$. Essas envoltórias foram ajustadas por uma lei de potência (3.43), com dois parâmetros livres. A forma da expressão de ajuste foi baseada na solução analítica para o limite de número de sítios e tempo infinitos (3.28). Os valores dos parâmetros ajustados correspondentes a diversos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ do Hamiltoniano XY(γ) para um sistema com 1200 sítios mostram uma nítida indicação do remanescente da criticalidade do sistema infinito no sistema finito, Figuras 3.2 e 3.12. Os valores dos parâmetros ajustados correspondentes a um sistema com 1200 sítios para o Hamiltoniano XY(h, γ) também mostraram uma nítida indicação do remanescente da criticalidade do sistema infinito no sistema finito. Foram encontrados dois tipos distintos de criticalidade chamados aqui de tipo (B) e (A), Figura 3.26 e 3.27, associados respectivamente às somatórias $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ (3.37) e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ (3.38). Ambos são caracterizados por formas diferentes das evoluções temporais, Figuras 3.20 e 3.19, respectivamente. A criticalidade do tipo (A) está ligada ao surgimento de *nesting* na curva de dispersão do Hamiltoniano. Esse *nesting*, em particular, surge somente se a curva de dispersão tiver dois vales, Figura 3.22. Esse tipo de *nesting* está associado à presença de *gap* no espectro de energia, porém a presença de *gap* nem sempre está associada a esse tipo de *nesting*.

Há indicações de que ambas criticalidades (B) e (A) do Hamiltoniano XY(h, γ) apresentam o mesmo salto do expoente da lei de potência (3.43),

$$\nu^\pm : \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{3}, \quad \text{XY}(h, \gamma), \rho_0(S^z), \quad (6.1)$$

enquanto a criticalidade do Hamiltoniano XY(γ) apresenta o salto,

$$\nu^+ : \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{4}, \quad \text{XY}(\gamma), \rho_0(S^z). \quad (6.2)$$

Os valores críticos $\frac{1}{3}$ e $\frac{1}{4}$ dos expoentes ν^\pm e ν^+ estão de acordo com a ordem das derivadas superiores de mais baixa ordem não nulas das funções Ω^\pm (3.22) calculadas nos pontos estacionários da variável k : expressões (3.48) e (3.47), Figura 3.30, e expressão (3.32), Figura 3.10.

Os ajustes numéricos feitos a partir das expressões analíticas correspondentes ao sistema finito com 1200 sítios, para o Hamiltoniano XY(γ), permitiram verificar a validade das hipóteses feitas ao se utilizar o método da Fase Estacionária e observar como a criticalidade do sistema infinito deixa sinais no sistema

finito. Para o Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$ os ajustes numéricos permitiram a identificação de dois tipos de criticalidades: a do tipo (B), análoga àquela presente no Hamiltoniano $XY(\gamma)$, e a do tipo (A), análoga àquela presente no Hamiltoniano $XX(J^{(2)})^{\text{onda}}$, seção 4.4.2.

6.1.1 XY — topologia, *nesting*

A criticalidade da relaxação da magnetização em uma cadeia de spin $\frac{1}{2}$ presente quando o Hamiltoniano é o $XY(\gamma)$, Figuras 3.12 e 3.14, a criticalidade do tipo (A) associada ao Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$, Figuras 3.26 e 3.27, e aquela associada ao Hamiltoniano $XX(J^{(2)})^{\text{onda}}$, Figura 4.18, surgem se a curva de dispersão apresentar *nesting*. Não foi mostrada ligação entre a criticalidade do tipo (B), associada ao Hamiltoniano $XY(h, \gamma)$, com o *nesting*. Quando há *nesting*, os processos de interferência construtiva da integral (3.25) são mais pronunciados na criticalidade do que fora dela. Por exemplo, a Figura 3.1 mostra o análogo finito do integrando em (3.25), para o Hamiltoniano $XY(\gamma)$, em duas situações: próximo e longe da criticalidade.

O *nesting* muitas vezes é acompanhado de um *gap*, porém nem sempre. Portanto a origem física da relaxação crítica, o *nesting*, é topológica. Não parece depender da integrabilidade, porque foi observada no $XX(J^{(2)})^{\text{onda}}$. A forma específica da curva de dispersão não é determinante pois as expressões (2.40) e (3.17) são distintas. Os resultados numéricos obtidos para os Hamiltonianos planares $XY(h, \gamma)$ e $XX(J^{(2)})^{\text{onda}}$, reforçam os resultados anteriores a este trabalho, dentro das condições onde eram válidos: presença de *nesting* e estados iniciais como $\rho_0(S^z)$ e $|l\rangle$. A evolução de um estado como por exemplo, $|\text{Pa}_{120}^{12}\rangle$, (4.41) gerada pelo Hamiltoniano $XX(J^{(2)})^{\text{onda}}$, embora apresente amortecimento suave da magnetização, Figura 4.12, não desenvolve a criticalidade característica do estado $|l\rangle$.

6.2 Cálculo numérico

6.2.1 XY(γ)

As evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ (3.20) a partir dos estados $\rho_0(S^z)$ (3.12) foram calculadas analiticamente para a versão fermiônica do Hamiltoniano $XY(\gamma)$ (3.14), $h = 0$, com condições de contorno c-cíclias, CC . As evoluções dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ (4.2) a partir dos estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$ (A.3) foram calculadas numericamente para a versão de spin do Hamiltoniano $XY(\gamma)$ (3.13), $h = 0$, em duas situações, uma onde $|M_l\rangle$ está associado ao Hamiltoniano fermiônico c-cíclio CC e a outra onde $|M_l\rangle$ está associado ao Hamiltoniano fermiônico não c-cíclio NCC . Os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ correspondentes aos estados $|M_l\rangle$ associados a cada uma das duas versões fermiônicas CC ou NCC coincidem com os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ correspondentes ao estado inicial $\rho_0(S^z)$, dependendo do número de onda $Q = q\frac{2\pi}{N}$ ser dado por q par ou ímpar. Esses resultados estão apresentados na seção 4.2.1 e resumidos na Tabela 4.1. No entanto

seria razoável a expectativa de que houvessem coincidências sempre que o estado $|M_l\rangle$ correspondesse ao Hamiltoniano CC , para qualquer Q .

Acredita-se que os cálculos realizados estejam corretos por causa dos testes de consistência mencionados na próxima seção, 6.2.2. Resta ser compreendido por que há resultados não esperados para q ímpar, Tabela 4.1. Uma das razões possivelmente decorre do fato de o estado $\rho_0(S^z)$ incluir mistura de estados $|M_l\rangle$ associados a ambas versões fermiônicas CC e NCC .

6.2.2 XYZ — consistência

A consistência do algoritmo de cálculo dos modos $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$ foi verificada para o Hamiltoniano XYZ, seção 4.2.3. Diferentes componentes do spin $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$, $\alpha = x, y, z$, diferentes estados iniciais e diferentes conjuntos de valores dos parâmetros de anisotropia (2.33) do Hamiltoniano XYZ podem ser convenientemente escolhidos de maneira que correspondam fisicamente à mesma situação: os testes consistem nas igualdades (4.20), (4.21), (4.22) e (4.23), as quais foram verificados para as condições (4.24). Tanto a diagonalização do Hamiltoniano como o cálculo dos valores médios $\langle S_Q^\alpha \rangle_t$ foram realizados com respeito a mesma base de estados de S^z , onde cada estado $|M_l\rangle$ da base é produto direto de auto-estados dos operadores de spin em cada sítio, S_j^z . Esses testes são bastante relevantes, porque os elementos de matriz das diferentes variantes do Hamiltoniano e das diferentes componentes do spin S_Q^α na mesma base são diferentes.

6.2.3 Modos longitudinais e transversais

Ao desacoplamento do processo de diagonalização entre subespaços definidos por diferentes autovalores de S^z , corresponde um desacoplamento da evolução temporal dos modos longitudinais da magnetização $\langle S_Q^z \rangle_t$ entre os mesmos subespaços, seção 4.1.1. Quando o Hamiltoniano é o XXZ, caracterizado por anisotropia axial da troca, os modos longitudinais $\langle S_Q^z \rangle_t$ ficam desacoplados entre os subespaços definidos por diferentes autovalores de S^z , e os modos transversais da magnetização $\langle S_Q^x \rangle_t$ e $\langle S_Q^y \rangle_t$ acoplam subespaços definidos por autovalores de S^z que diferem por uma unidade e nos quais o estado inicial tenha componentes. Os modos longitudinais foram mais analisados que os transversais. No Hamiltoniano de Heisenberg com anisotropia arbitrária XYZ ocorrem menos desacoplamentos de subespaços de S^z . A relaxação dos modos longitudinais é desacoplada em apenas dois grandes subespaços e a dos modos transversais envolve todo o espaço de estados. Não se pode tratar separadamente o subespaço de uma onda de spin.

O cálculo da magnetização no espaço completo de estados para cadeias com até 10 sítios gastou poucos minutos de computação e para cadeias com até 12 sítios gastou algumas horas.

6.2.4 XXZ — simetrias espaciais

Foi construída uma base de estados caracterizados pela simetria espacial da cadeia de spins, com condições de contorno periódicas, no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z , seção 2.2. Essa base possibilitou o cálculo das evoluções temporais dos modos longitudinais da magnetização $\langle S_Q^z \rangle_t$, para o Hamiltoniano XXZ, seção 4.3.2. Cadeias com até 14 sítios foram analisadas com gasto de poucos minutos de computação para estados iniciais definidos por simetrias particulares, e com gasto de horas para estados iniciais do tipo produto direto.

Os estados da base caracterizados pela simetria espacial da cadeia de spins foram construídos exclusivamente com coeficientes reais em termos de estados do tipo produto direto, de maneira que as matrizes que representam o Hamiltoniano também apresentam apenas coeficientes reais. Tais estados foram obtidos através do uso dos Operadores de Projeção associados às Representações Irredutíveis unidimensionais e às colunas das RI bidimensionais de um dos grupos de simetria espacial do Hamiltoniano. Qualquer um entre os grupos D_N ou C_{Nv} , os quais são isomorfos, fornece projetores equivalentes. As bases cujos estados contêm as simetrias espaciais foram construídas corretamente em todo o subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z para cadeias com 10 ou 14 sítios, porém somente para os estados associados às RI unidimensionais, onde se encontra o estado fundamental, para as cadeias com 8, 12 ou 16 sítios. Uma vez que os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ envolvem em geral os estados associados às RI bidimensionais, seu cálculo não foi feito através desse tipo de base de estados para 8, 12 ou 16 sítios. Houve uma tentativa de se construir uma base de estados que incluísse além das simetrias espaciais, a simetria de inversão temporal. Tanto para cadeias com 10 ou 14 como para aquelas com 8, 12 ou 16, sítios somente construíram-se corretamente os estados associados às RI unidimensionais, o que não é suficiente para o cálculo dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$.

6.2.5 14 sítios — relaxação rápida

Uma das principais conclusões deste trabalho diz respeito à evolução temporal da magnetização a partir de estados do tipo produto direto contidos no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z . Tais estados quando expressos na base dos auto-estados do Hamiltoniano envolvem em geral muitos auto-estados, Tabela 4.4. Nesse sentido um estado do tipo produto direto é em geral um estado bastante arbitrário. Entre os estados iniciais escolhidos estão estados do tipo produto direto, um com muitas interfaces entre spins para cima e para baixo e outro do tipo parede, e superposições desses estados construídas através dos projetores do grupo de simetria espacial, (4.37) e (4.38). O resultado importante é que a partir dos estados com muitas interfaces, ou de uma superposição correspondente, desenvolvem-se processos de extinção rápida dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ para todos os números de onda Q e para qualquer valor não nulo do parâmetro de anisotropia Δ do Hamiltoniano XXZ, ou seja, quer haja *gap* no espectro de energia ou não. A Figura 4.6 mostra exemplos para $Q = \frac{2\pi}{14}$. A partir dos estados do tipo parede observaram-se

processos de extinção rápida da magnetização quando simultaneamente não há *gap*, $\Delta \leq 1$, e quando $\Delta \neq 0$, e processos de extinção lentos, quando há *gap*, $\Delta > 1$, Figura 4.7.

Acredita-se que já se tenha atingido o limite de muitos graus de liberdade, no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z , na cadeia XXZ com 14 sítios. Especialmente se se tomam os estados do tipo produto direto como estados iniciais. As dimensões dos espaços de estados acessíveis às evoluções dos estados iniciais analisados são grandes, Tabela 4.4. *Conclui-se que o mais relevante para a relaxação da magnetização é que a dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução do estado inicial seja ‘grande’, e não necessariamente que o número de sítios da cadeia seja ‘grande’, seção 4.3.4, página 91.* O comportamento da evolução do próprio estado ao invés de sua magnetização pode ser indicado por duas grandezas, a recorrência e a fidelidade, as quais serão mencionadas na seção 6.2.8.

6.2.6 14 sítios — ondas estacionárias

Há uma regra de seleção que especifica a quais números de onda Q corresponderão modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ identicamente nulos para qualquer tempo, seção 4.3.2. Tal regra torna-se evidente quando se escreve o estado inicial em termos de uma base cujos estados sejam caracterizados pelos índices de Representação Irredutível do grupo de simetria espacial e de suas colunas, (4.25) ou (4.36). Por exemplo, para a cadeia com 10 sítios tal regra está indicada na Tabela 4.3. Se por um lado os estados do tipo produto direto em geral são descritos por superposições de estados de diversos índices de RI e de suas colunas, por outro lado restringindo convenientemente a simetria do estado inicial é possível obter apenas dois modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ não nulos, com Q_r e $2\pi - Q_r$, Figura 4.5. Tal evolução apresenta analogias com uma corda vibrante. Entretanto há diferenças, pois a cadeia de spins finita é um sistema discreto, e a corda vibrante um sistema contínuo. A corda vibrante está submetida a um vínculo externo que mantém fixas as suas extremidades, enquanto que a cadeia de spins desacoplada do ambiente externo com condições de contorno periódicas não possui esse tipo de vínculo.

6.2.7 Um spin girado

Para o Hamiltoniano XXZ as evoluções dos modos longitudinais da magnetização $\langle S_Q^z \rangle_t$ no subespaço de uma onda de spin coincidem com as evoluções geradas pelo Hamiltoniano planar XX. A partir de um estado do tipo produto direto desenvolve-se relaxação amortecida por uma lei de potência. Há evoluções bastante distintas a partir de outros estados iniciais. Três padrões distintos de evolução dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ são notáveis: o de relaxação, caracterizado por oscilações amortecidas por uma lei de potência, Figuras 4.10 e 4.12, aquele parecido com um ruído, Figuras 4.11 e 4.13, e o trivial a partir de um autoestado. Compararam-se as evoluções geradas pelo Hamiltoniano XX a partir dos estados $|l\rangle$ e $\rho_0(S^z)$, Figura 4.9. Emergiram coincidências e não coincidências dependendo do número de onda, Tabela 4.1, o que também havia sido observado no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z , seções 4.2.1

e 6.2.1. A não coincidência manifesta-se somente a partir da ocorrência da primeira reconstrução parcial, Figura 4.9.

Introduziram-se acoplamentos homogêneos entre segundos vizinhos, seção 4.4.2, o que corresponde a um Hamiltoniano não integrável. A partir de um estado do tipo produto direto a evolução da magnetização não depende do sinal do parâmetro das interações entre segundos vizinhos $J^{(2)}$. Uma vez que o valor das interações entre primeiros vizinhos foi mantido fixo, $J^{(1)} = 1$, haverá frustração ou não no alinhamento dos spins da cadeia conforme o sinal de $J^{(2)}$. É curioso o fato de que o sinal de $J^{(2)}$ não afete a evolução da magnetização a partir de um estado do tipo produto direto. Não há *gap* para nenhum $J^{(2)}$. Surge *nesting* na curva de dispersão quando $|J^{(2)}| > J_{nest}^{(2)} = \frac{1}{4}$, (4.48) e (4.49), o que é acompanhado do surgimento de uma criticalidade na relaxação da magnetização. Há uma série de analogias com a criticalidade do tipo (A) presente no Hamiltoniano XY(h, γ): mesmo salto do expoente $\nu = \frac{1}{2} \rightarrow \nu_c = \frac{1}{3}$; os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ que indicam a criticalidade oscilam inicialmente em torno de um patamar acima de zero; o *nesting* é caracterizado pela presença de dois vales na curva de dispersão, os quais não surgem para quaisquer valores dos parâmetros $J^{(2)}$ ou (h, γ); há notável coincidência entre as diferenças de momento entre os mínimos da curva de dispersão e os valores dos números de onda associados à criticalidade inferidos a partir das curvas de $\langle S_Q^z \rangle_t$, Tabelas 4.7 e 3.3; a dependência do tempo transcorrido até a primeira reconstrução parcial com o número de onda, t_r vs Q , Figuras 4.16 e 3.25.

6.2.8 Recorrência e Fidelidade

Com a finalidade de se analisar a evolução temporal do próprio estado quântico, ao invés de sua magnetização, calcularam-se a recorrência e a fidelidade, seção 4.6, as quais relacionam o estado evoluído no tempo com o estado inicial. Nos subespaços de uma ou de duas ondas de spin em sistemas suficientemente grandes, o estado evoluído no tempo a partir de um produto direto, direciona-se a um subespaço ortogonal ao estado inicial. Esse processo constitui uma espécie de relaxação, a qual não se completa pois a recorrência e a fidelidade exibem reconstruções parciais de seus valores iniciais, Figuras 4.25, 4.26 e 4.27. O cálculo no subespaço de duas ondas foi feito com o objetivo de se verificar se os tempos de reconstrução parcial da recorrência e da fidelidade são proporcionais ao número de sítios da cadeia ou à dimensão do espaço de estados. Obteve-se a primeira das duas possibilidades.

Por outro lado, a evolução a partir de um estado do tipo produto direto com muitas interfaces entre spins para cima e para baixo, contido no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , é irreversível e direciona-se rapidamente para estados ortogonais ou quase ortogonais ao estado inicial, Figura 4.28, quando a dinâmica é gerada pelo Hamiltoniano XXZ com $\Delta \neq 0$. Não há reconstruções parciais evidentes. Há uma correspondência entre dois processos de relaxação rápida: o direcionamento do estado evoluído no tempo para estados quase ortogonais ao estado inicial, e os processos de extinção das componentes de Fourier da magnetização, Figura 4.6, seção 4.3.4. Isso constitui uma importante indicação de que o

mais relevante para a evolução temporal — a partir desse tipo de estado inicial com muitas interfaces — é o fato de a dimensão do espaço de estados acessíveis à evolução do estado inicial ser ‘grande’, e não necessariamente o número de sítios da cadeia ser ‘grande’. Essa é uma conclusão análoga àquela enunciada na seção 4.3.4, página 91.

6.2.9 Partículas independentes e não independentes

Pode ser que a relaxação característica da família de Hamiltonianos XY com comportamento oscilatório e amortecido por uma lei de potência seja uma particularidade de o sistema ser equivalente a um sistema de pseudo partículas independentes (3.16), as quais são férmions sem spin. Não há espalhamento entre as partículas. A análise através do método da Fase Estacionária e a interferência construtiva parecem depender do fato de as partículas serem independentes e manterem o seu momento sem espalhamento.

As versões fermiônicas dos Hamiltonianos XY, c-cíclica e não c-cíclica [12], estão definidas em dois espaços de estados, cada um com dimensão N , muito menores que as dimensões de cada um dos dois correspondentes espaços de estados nas versões de spin, 2^{N-1} . O Hamiltoniano XXZ tem dois subespaços de uma onda de spin, cada um com dimensão N . Em cada subespaço de uma onda, as evoluções geradas pelo Hamiltoniano XXZ para os modos longitudinais da magnetização $\langle S_Q^z \rangle_t$ coincidem com as evoluções geradas pelo Hamiltoniano planar XX, independentemente do parâmetro Δ .

Por outro lado, no subespaço definido pelo autovalor nulo do operador S^z , cuja dimensão é o número combinatório $(N \ N/2)$, há expectativa de que os auto-estados do Hamiltoniano XXZ na versão fermiônica não sejam partículas independentes. Nesse subespaço não se desenvolve relaxação amortecida por uma lei de potência, ao contrário, o processo de relaxação é rápido. Tais processos rápidos decorrem dos espalhamentos entre as partículas fermiônicas.

Conclui-se então que para haver relaxação amortecida por uma lei de potência o estado inicial precisa estar contido em um espaço de estados onde os auto-estados do Hamiltoniano sejam descritos por partículas independentes. Os subespaços identificados neste trabalho que se enquadram nessa última condição têm dimensão N .

6.2.10 Simetrias Escondidas — Degenerescências

A drástica redução da dimensão do espaço de estados da versão de spin para a versão fermiônica do Hamiltoniano planar XY, e o fato de os auto-estados serem de partículas independentes, serão atribuídos a simetrias *escondidas* presentes nesse Hamiltoniano. Tais simetrias escondidas encontram-se nas coordenadas de spin, não são as simetrias espaciais nem a de inversão temporal. Essas simetrias escondidas nas coordenadas de spin contribuem para que haja altas degenerescências dos níveis dos Hamiltonianos planares na versão de spin. As degenerescências contidas no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z ilustram a situação. Os Hamiltonianos planares XX com condições de contorno periódicas para cadeias

com 14 e 10 sítios apresentam muito mais degenerescências que os Hamiltonianos XXZ, Tabelas 2.4 e 2.5. Embora as simetrias espaciais também contribuam para a existência daquelas altas degenerescências, fica evidente que mesmo na ausência das simetrias espaciais, por exemplo quando a cadeia tem extremidades livres, o Hamiltoniano planar XX apresenta degenerescências enquanto o XXZ apresenta em geral apenas singletos, Tabela 2.6. Outra indicação de que o Hamiltoniano planar XX apresenta simetrias escondidas nas coordenadas de spin, independentes das coordenadas espaciais, consiste no fato de haver degenerescências maiores que um , quando a cadeia de spins tem uma interação de troca $J^{(\text{imp})}$ diferente das demais interações, Tabela 2.7. Quando $J^{(\text{imp})} \neq 1$ o grupo de simetria espacial reduz-se de D_N , com $2N$ elementos, para um grupo com apenas 2 elementos, cujas RI têm dimensão um .

Retornando-se à análise apenas das cadeias com condições de contorno periódicas, deve-se enfatizar que qualquer um dos 2^{N-1} estados do tipo produto direto na versão de spin, associados ao Hamiltoniano fermiônico c-cíclico, desenvolverão relaxação amortecida por uma lei de potência se o Hamiltoniano for o XY. Possivelmente os outros 2^{N-1} estados do tipo produto direto, associados ao Hamiltoniano fermiônico não c-cíclico, também desenvolverão a mesma forma de relaxação. Por outro lado os $(N/2)$ estados do tipo produto direto do subespaço de autovalor nulo de S^z não desenvolverão relaxação amortecida por uma lei de potência se o Hamiltoniano for o XXZ. Sabe-se que os $2N$ estados do tipo produto direto dos dois subespaços de uma onda desenvolverão aquela lei de relaxação. Uma vez que nesse subespaço o Hamiltoniano XXZ apresenta apenas singletos e dubletos, conclui-se que não é necessário haver altas degenerescências dos níveis de energia, para que uma fração pequena do espaço de estados do sistema contenha estados do tipo produto direto que desenvolvam relaxação amortecida por uma lei de potência.

Conjectura-se que a dinâmica gerada pelo Hamiltoniano XYZ não exibirá relaxação amortecida por uma lei de potência para nenhum estado, pelo fato de esse Hamiltoniano ser desacoplado em apenas dois subespaços de grande dimensão 2^{N-1} , e de apresentar baixas degenerescências, somente singletos e dubletos.

Resumindo, a relaxação amortecida por uma lei de potência para os seguintes Hamiltonianos decorrerá dos seguintes estados iniciais do tipo produto direto: XYZ, nenhum; XXZ, produtos diretos com apenas um spin girado; XY, todos produtos diretos.

Fica estabelecida uma relação entre a existência de processos de relaxação amortecidos por uma lei de potência, a partir de estados do tipo produto direto, e a estrutura do espectro de energia, especificamente com suas degenerescências. *Quanto mais degenerescências dos níveis de energia o Hamiltoniano possuir; ou, havendo poucas degenerescências, quanto mais desacoplamentos da matriz do Hamiltoniano houver entre os subespaços do operador S^z ; ou seja, quanto mais simetrias o Hamiltoniano tiver nas variáveis de spin, maior será a quantidade de estados do tipo produto direto que desenvolverão relaxação da magnetização, oscilatória e amortecida por uma lei de potência.*

Resta ser esclarecida a seguinte questão. Quais são as simetrias escondidas associadas às coordenadas de spin presentes no Hamiltoniano XY que estão ausentes no XXZ? *Qual é o grupo de simetria que as descreve?* O Hamiltoniano XXZ escrito na versão fermiônica inclui um termo de interação entre as pseudo partículas. As simetrias escondidas do Hamiltoniano XY possivelmente decorrem da ausência das interações entre as partículas fermiônicas.

Uma vez que ambos Hamiltonianos XY e XXZ são integráveis e geram comportamentos bastante distintos para a relaxação da magnetização, conclui-se que a integrabilidade não é a característica determinante para a relaxação amortecida por uma lei de potência e sua criticalidade. Seria a integrabilidade um pré-requisito? Possivelmente não porque o Hamiltoniano que envolve interações entre segundos vizinhos, também desenvolve relaxação amortecida por uma lei de potência e criticalidade no subespaço de uma onda. Esse Hamiltoniano é não integrável embora tenha soluções analíticas no subespaço de uma onda. O Hamiltoniano que envolve impurezas também é não integrável e desenvolve relaxação amortecida por uma lei de potência.

6.2.11 Impurezas

Os auto-estados do Hamiltoniano XXZ, com impurezas, contidos no subespaço de uma onda dependem do parâmetro de anisotropia Δ , (2.6), e do acoplamento referente às impurezas $J^{(\text{imp})}$, (2.43) e Figura 2.2. Se os estados iniciais forem do tipo produto direto, emergem processos cuja relaxação é caracterizada por oscilações amortecidas por uma lei de potência.

Para estados iniciais mais restritos, com o spin girado em, ou próximo a, um sítio que participa de uma ligação da impureza, e se houver um *gap* no espectro da banda de uma onda de spin, emergem processos ainda mais lentos. Esses processos mais lentos não são caracterizados por uma criticalidade nas vizinhanças de um número de onda crítico, ao contrário, estão associados a uma faixa larga de números de onda Q para os quais os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ oscilam ao redor de patamares não nulos até a primeira reconstrução parcial da magnetização, Figura 4.20. Isso indica que no equilíbrio o sistema é caracterizado por magnetização espacialmente não homogênea, o que reflete a falta de simetria de translação do Hamiltoniano. Tais processos mais lentos não estão associados a *nesting* uma vez que nem se define o momento de um estado, devido a quebra da simetria translacional. A presença de um *gap* no espectro da banda de uma onda de spin depende dos parâmetros $J^{(\text{imp})}$ e Δ , Figura 2.3.

6.2.12 Periodicidade

Em sistemas pequenos, onde os autovalores do Hamiltoniano sejam todos números comensuráveis entre si, as evoluções de qualquer grandeza, magnetização, recorrência e fidelidade são periódicas. Surgem frequências de Rabi.

Para sistemas maiores, as superposições de dois auto-estados apresentam evolução da magnetização

nula ou periódica, com frequências de Rabi. Na dinâmica gerada pelo XXZ observaram-se ondas estacionárias a partir de estados iniciais definidos por simetrias espaciais.

Frequências de Rabi de uma certa maneira estão associadas a regularidade de órbitas no espaço de fase. A relaxação rápida característica do XXZ no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z a partir de estados com muitas interfaces, ou combinações desses estados, de uma certa maneira está associada a órbitas irregulares no espaço de fase.

6.2.13 Temperatura de Spin

Nas situações onde emergem processos lentos de relaxação da magnetização, há dúvida sobre a possibilidade de se definir a chamada temperatura de spin. A relaxação em um sistema de spins acoplado à graus de liberdade externos é caracterizada por dois tempos característicos. O menor tempo característico, T_2 , diz respeito à relaxação dos graus de liberdade de spin. Esse tempo precisa ser muito menor que o tempo correspondente à relaxação dos graus de liberdade de spin em conjunto com os da rede, T_1 . A temperatura de spin é definida após tempos da ordem de T_2 e antes de tempos da ordem de T_1 . Nas circunstâncias onde se desenvolvem processos lentos de relaxação da magnetização na presença de apenas graus de liberdade de spin, T_2 grande, há possibilidade de os dois tempos característicos T_1 e T_2 serem comparáveis, de maneira que não exista um regime temporal definido por equilíbrio entre as variáveis de spin independente das variáveis externas.

6.2.14 Computação Quântica

Quando se tratam sistemas de spins $\frac{1}{2}$ localizados, cujas interações sejam modeladas pela troca, especula-se sobre a possibilidade de haver alguma conexão com o recente campo de pesquisa que é a computação quântica [27]. Cada unidade de um computador quântico, *qubit*, consistiria em um sistema quântico com dois níveis, ao invés de um *bit* clássico. As interações entre essas unidades seriam descritas pela troca entre spins $\frac{1}{2}$. Caso no futuro seja construído um computador quântico, ele apresentará vantagens sobre os atuais computadores clássicos, as quais decorrerão da manipulação de superposições coerentes de estados quânticos. Há duas aplicações onde se deseja utilizar a CQ. Para a resolução de algoritmos como por exemplo aquele de fatoração de um número inteiro em fatores primos [28], ou para a simulação de sistemas quânticos [29].

O algoritmo para fatoração de um número inteiro envolve sequências de operações unitárias aplicadas em apenas *um* ou *dois* qubits separadamente. A evolução do estado quântico a medida que tais operações sejam realizadas será muito diferente da evolução analisada neste trabalho, descrita por Hamiltonianos que envolvem conjuntamente todos os qubits do sistema, apesar de os Hamiltonianos conterem apenas interações entre primeiros vizinhos ou ainda entre segundos vizinhos.

A conexão entre a relaxação da magnetização analisada neste trabalho e a CQ poderia ser feita

através da simulação dos estados iniciais e das interações associadas aos Hamiltonianos aqui tratados em um computador quântico. Seria uma realização experimental da cadeia de spins, a qual permitiria analisar-se o problema específico da relaxação da magnetização. Evidentemente, no arranjo experimental haverá acoplamentos entre os graus de liberdade de spin com o ambiente, e um modelo mais realista deveria incluir as interações dos Hamiltonianos de spin com variáveis de um banho.

6.3 Emaranhamento

Uma questão que se desejava entender diz respeito à possibilidade de a dinâmica promovida por um Hamiltoniano de spins gerar emaranhamento em um estado inicialmente não emaranhado. Calcularam-se algumas grandezas associadas ao emaranhamento no subespaço de uma onda de spin, onde aquelas grandezas são facilmente calculáveis, uma delas é a soma de todos os pares de concorrências entre dois sítios, e as outras duas quantificam o emaranhamento global, Capítulo 5.

De fato se gera emaranhamento a partir de um estado separável. Isso decorre do fato de a evolução unitária gerada pelo Hamiltoniano ser global; isto é, ela envolve todos os sítios do sistema conjuntamente, através do acoplamento entre primeiros ou entre primeiros e segundos vizinhos. Em sistemas pequenos com 4 ou 6 sítios, seção 5.7.1, a evolução é reversível e periódica, e o estado inicial é reconstruído indefinidamente. Em sistemas grandes, por exemplo a partir de 60 sítios, o sistema evolui sem retornar ao estado inicial, o emaranhamento é criado, aumenta, e atinge um patamar de saturação, seção 5.7.2. Há relações entre os tempos transcorridos até as saturações do emaranhamento e os tempos transcorridos até as reconstruções da recorrência e da fidelidade, seção 5.7.4. O tempo transcorrido até a saturação coincide com o tempo de propagação de uma perturbação desde o sítio onde o spin está inicialmente girado até o sítio mais distante, Figuras 5.1 e 5.3.

A localização espacial do estado, na cadeia de spins, apresenta correspondências com o emaranhamento, seção 5.7.5. Quanto mais delocalizado está o estado, maior seu emaranhamento. Essa correspondência decorre de a dinâmica estar restrita ao subespaço de uma onda. Não se espera que seja válida para qualquer estado contido no espaço completo de 2^N estados, onde há estados delocalizados emaranhados e não emaranhados.

Na presença de interações entre segundos vizinhos a perturbação caracterizada pelo spin inicialmente girado propaga-se mais rapidamente pela cadeia, seção 5.8.

6.4 Trabalhos correlacionados em andamento

Há trabalhos relacionados à dinâmica em uma cadeia de spins propostos pelo Prof. Cabrera a dois pesquisadores. Um trabalho consiste na análise da relaxação da magnetização em uma cadeia de spins $\frac{1}{2}$ acoplada a graus de liberdade externos, em particular a um banho de fônons. O outro trabalho

consiste na análise das evoluções temporais dos elementos de matriz do operador densidade em alguma base de estados de interesse. Deve-se notar que esse problema é distinto do problema da relaxação da magnetização analisado analiticamente através da equação de Liouville para os Hamiltonianos da família XY [2, 3, 4], onde os valores médios da magnetização foram calculados utilizando-se sempre o valor inicial do operador densidade (3.8).

Apêndice A

Simetrias

A.1 Hamiltoniano em Blocos

O processo de diagonalização de uma matriz que representa um operador Hamiltoniano corresponde à obtenção de todos os autovalores e autovetores dessa matriz. A representação matricial do operador Hamiltoniano depende da base do espaço de estados. A operação de diagonalização envolve todos os elementos da matriz. Em princípio o processo envolve todos os elementos conjuntamente, requerendo número de operações da ordem de $n!$, onde n é a dimensão da matriz. Porém, se o Hamiltoniano possui simetrias é possível em princípio, e pode ser factível, construir uma base de estados apropriada, de maneira que se facilite a diagonalização. A matriz que representa o Hamiltoniano pode ser obtida com elementos não nulos apenas em blocos situados na diagonal principal. Então, cada bloco é diagonalizado separadamente, e o número de operações para diagonalização reduz-se de $n!$ para,

$$\sum_i n_i!, \quad \text{onde } \sum_i n_i = n. \quad (\text{A.1})$$

Há que se procurar por operadores que comutam com o Hamiltoniano. Esses operadores podem corresponder à observáveis físicos ou a operações de simetria unitárias. O Hamiltoniano tem elementos de matriz nulos entre os auto-estados, de um observável que comute com ele, associados a autovalores diferentes daquele observável.

Os operadores de simetria que deixam o Hamiltoniano invariante e não correspondem à observáveis físicos, podem ser unitários ou anti-unitários. As operações espaciais, como por exemplo as rotações, são descritas por operadores unitários. O operador de Inversão Temporal é um exemplo de operador anti-unitário.

Os operadores unitários de simetria que comutam com o Hamiltoniano formam um grupo. Através dos Operadores de Projecção do grupo finito de simetria espacial (A.5) é possível construir uma base de

estados classificados segundo índices que desempenham em um certo sentido o papel de bons números quânticos. Esses índices não são bons números quânticos, pois, não são o resultado da medida de um observável físico. Porém, estão associados à regras de seleção que especificam elementos de matriz nulos do Hamiltoniano.

$$\langle \mu, i | \mathcal{H} | \mu', i' \rangle = 0, \quad \text{se } \mu \neq \mu' \text{ ou se } i \neq i', \quad (\text{A.2})$$

onde, μ e i , indicados na definição (A.5), são índices que especificam uma Representação Irredutível e uma coluna dessa RI. O grupo unitário de simetria espacial que comuta com os Hamiltonianos de spin tratados neste trabalho também comuta com o observável S^z . Geram-se estados do tipo $|s^z, \mu, i\rangle$, os quais determinam a forma da matriz do Hamiltoniano em blocos situados na diagonal principal.

A.1.1 Auto-estados de Operadores Spin

Apesar de os auto-estados do operador do spin total \mathbf{S} (2.3) não terem sido utilizados neste trabalho, foi constatada anteriormente, [30] a possibilidade de gerarem-se esses auto-estados para um sistema de 4 sítios, através do chamado Projeter de Young, um projetor otimizado do Grupo das Permutações. O uso desses projetores, assim como os projetores referentes às simetrias espaciais discutidos adiante, não previne a necessidade de posterior ortogonalização da base de estados e diagonalização da matriz do Hamiltoniano.

Constrói-se facilmente uma base de auto-estados comum aos operadores S^z , \mathcal{L} (2.10) e S_j^z , $j = 1, \dots, N$. A existência de uma base comum decorre das relações de comutação $[S^z, \mathcal{L}] = 0$, $[S_j^z, \mathcal{L}] = 0$ e $[S_j^z, S^z] = 0$. Essa base é formada pelos estados resultantes do produto direto dos auto-estados dos S_j^z . Um exemplo de um vetor dessa base é,

$$|\uparrow\uparrow\downarrow \cdots \uparrow\rangle = |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \otimes |\downarrow\rangle_3 \otimes \cdots \otimes |\uparrow\rangle_N. \quad (\text{A.3})$$

Esse tipo de estado será simbolizado por $|M_l\rangle$.

Os autovalores distintos de S^z , para N par, são todos os $N + 1$ números inteiros $0, \pm 1, \dots, \pm \frac{N}{2}$. A degenerescência de cada autovalor s^z , $S^z |M_l\rangle = s^z |M_l\rangle$ é dada pelo número combinatório,

$$K^{N, N_\uparrow} = \binom{N}{N_\uparrow}, \quad (\text{A.4})$$

onde os números de spin para cima e para baixo associados aos estados de mesmo autovalor s^z são dados pelas relações $N_\uparrow + N_\downarrow = N$ e $\frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{2} = s^z$. A soma de todas as degenerescências é a dimensão de todo espaço de estados $\sum_{N_\uparrow=0}^N K^{N, N_\uparrow} = 2^N$.

A.2 Operador de Projeção de um Grupo Finito

O Operador de Projeção de um grupo finito associado a uma Representação Irredutível e a uma coluna dessa RI, [13], é construído a partir dos elementos diagonais das matrizes da RI, associadas a todos os elementos do grupo, e correspondentes a uma coluna dessas matrizes. Quando as representações estão escritas na forma unitária, o Operador de Projeção toma a forma,

$$P_i^{(\mu)} = \frac{n_\mu}{g} \sum_R \Gamma_{ii}^{(\mu)*}(R) O_R, \quad (\text{A.5})$$

onde os índices μ e i correspondem à uma RI e a uma coluna, n_μ é a dimensão da RI, e a somatória é feita sobre todos os g elementos do grupo. $\Gamma_{ii}^{(\mu)}(R)$ são os i -ésimos elementos diagonais das g matrizes que constituem a RI $\Gamma^{(\mu)}$, associadas a cada elemento R do grupo. Para um dado índice μ , a escolha da representação de matrizes em geral não é única. Pode haver infinitas possibilidades, porém, todas elas são equivalentes entre si, no sentido que qualquer RI $\Gamma^{(\mu)}$ pode ser obtida a partir de outra RI associada a μ através de uma transformação de semelhança,

$$S \Gamma^{(\mu)}(R) S^{-1} = \Lambda^{(\mu)}(R), \quad \forall R \in \mathcal{G}, \quad (\text{A.6})$$

realizada por uma única matriz S . As RI $\Gamma^{(\mu)}$ e $\Lambda^{(\mu)}$ são ditas equivalentes. Nenhuma delas possui mais informação relevante que a outra.

Ao elemento R do grupo associa-se uma transformação que leva um objeto x em outro objeto x' dentro de um espaço vetorial linear. O operador linear O_R associado a essa transformação R , chamado operador de Wigner, atua em funções $\psi(x)$. Dada qualquer função $\psi(x)$, o efeito do operador de Wigner é alterá-la para a função $O_R \psi \equiv \psi'$ tal que satisfaça a definição,

$$\psi'(x') \equiv O_R \psi(x) = \psi(x), \quad \text{se } x' = Rx. \quad (\text{A.7})$$

O operador O_R define as n_μ funções de base de cada RI e as matrizes da representação,

$$O_R \psi_i^{(\mu)} = \sum_{j=1}^{n_\mu} \psi_j^{(\mu)} \Gamma_{ji}^{(\mu)}(R), \quad \mu = 1, \dots, n_\mu, \quad (\text{A.8})$$

a função $\psi_i^{(\mu)}$ é designada como sendo a i -ésima função de base da μ -ésima RI.

Os objetos a serem transformados podem ser coordenadas espaciais em espaços de dimensão *um* ou *dois*, por exemplo, ou podem ser as coordenadas de sítios da cadeia de spins.

A.3 Inversão Temporal

A ação do operador de inversão temporal equivale à mudança do sinal de todos os momentos de um sistema, momentos lineares, momentos angulares orbitais e momentos angulares de spin, e do sinal

de campos magnéticos internos do sistema. Quando o operador de inversão temporal T é aplicado ao operador de spin $\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z)$ obtém-se,

$$\mathsf{T}\mathbf{S}\mathsf{T}^{-1} = -\mathbf{S}. \quad (\text{A.9})$$

A motivação para essa definição tem origem em contextos onde a inversão temporal deixa invariante a interação spin órbita $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, uma vez que $\mathsf{T}\mathbf{L}\mathsf{T}^{-1} = -\mathbf{L}$. Nitidamente T comuta com os Hamiltonianos de troca apresentados neste trabalho, os quais são somas de termos do tipo $S_j^\alpha S_{j+1}^\alpha$, quer haja ou não impurezas,

$$[\mathcal{H}, \mathsf{T}] = 0. \quad (\text{A.10})$$

Porém, T não comuta com um termo de campo magnético externo $h \sum_j S_j^\alpha$.

O operador T expresso na base dos auto-estados de S_j^z , a menos de um fator de fase arbitrário, tem a forma,

$$\mathsf{T} = K \prod_{j=1}^N \sigma_j^y, \quad (\text{A.11})$$

onde K é a operação de conjugação complexa, a qual atua nos coeficientes de cada estado. Essa forma do operador de inversão temporal, dada pela operação de conjugação complexa seguida de um operador unitário, explicita o fato de tratar-se de um operador anti-unitário.

A.4 Possíveis degenerescências — inversão temporal

A título de curiosidade será feito um teste rápido para se investigar a possível existência de degenerescências nos níveis de energia devido à simetria de inversão temporal [31]. Há duas abordagens para se tratar essa questão. Uma abordagem consiste na construção de um grupo formado pelas operações de simetria espaciais, \mathcal{G}^E , e pelas operações resultantes da multiplicação do operador de inversão temporal T pelos elementos do grupo espacial \mathcal{G}^E , $\mathsf{T}\mathcal{G}^E$. Esse é o caso para um sistema com spin total inteiro. A condição de spin total inteiro é satisfeita pela cadeia de número par de spins $\frac{1}{2}$. Como já foi dito, impõe-se número par de sítios a fim de se evitar problema de frustração no ordenamento de estados antiferromagnéticos, na cadeia com condições de contorno periódicas. Se o spin total do sistema fosse semi-inteiro, o grupo de simetria espacial deveria ser estendido para o chamado *grupo dobrado*. E então, aos elementos do grupo dobrado dever-se-iam juntar os produtos do operador de inversão temporal por esses mesmos elementos.

A inclusão do operador de inversão temporal em um grupo implica em uma mudança na teoria usual de representação de grupo. Isso porque o operador de inversão temporal é anti-unitário, assim como suas representações. A álgebra das operações anti-unitárias é que muda a maneira usual de se multiplicar

matrizes e aplicar operadores. Por isso, em geral não se utiliza a abordagem com a inclusão do operador de inversão temporal ao grupo de simetria espacial.

A segunda abordagem para se verificar a presença de degenerescências extras devidas à simetria de inversão temporal é mais simples. Basta se tirar proveito dos seguintes resultados. Aplicando o operador de inversão temporal T às funções de base $\psi_j^{(\mu)}$ de uma dada RI $\Gamma^{(\mu)}$, com dimensão n_μ , de um grupo de simetria espacial \mathcal{G}^E , obtém-se um conjunto de funções $T\psi_j^{(\mu)}$. É possível mostrar duas propriedades. A primeira propriedade é que esse novo conjunto de funções forma um subespaço invariante sob a ação dos elementos do grupo espacial \mathcal{G}^E , e são funções de base de uma representação $\Gamma^{(\tau)}$ do mesmo grupo e de mesma dimensão que $\Gamma^{(\mu)}$. A segunda propriedade é que tal representação $\Gamma^{(\tau)}$ é irredutível.

Há três possíveis relações entre as RI $\Gamma^{(\mu)}$ e $\Gamma^{(\tau)}$,

- caso *a*: $\Gamma^{(\mu)}$ e $\Gamma^{(\tau)}$ são equivalentes e podem ser escolhidas como sendo reais e idênticas;
- caso *b*: $\Gamma^{(\mu)}$ e $\Gamma^{(\tau)}$ não são equivalentes;
- caso *c*: $\Gamma^{(\mu)}$ e $\Gamma^{(\tau)}$ são equivalentes, mas não podem ser escolhidas como sendo reais e idênticas.

A partir da classificação dos três casos acima e do spin total do sistema é possível verificar a existência de degenerescências devido à simetria de inversão temporal, ou seja, se os dois conjuntos de funções de base $\psi_j^{(\mu)}$ e $T\psi_j^{(\mu)}$ das representações $\Gamma^{(\mu)}$ e $\Gamma^{(\tau)}$ são linearmente dependentes ou não [31, 32].

$T^2 = 1$, spin total inteiro:

- a* O conjunto de funções de base $T\psi_j^{(\mu)}$ pode ser escolhido de maneira que $T\psi_j^{(\mu)} = \psi_j^{(\mu)}$, e não há degenerescência além da degenerescência n_μ .
- b* O conjunto de funções de base $T\psi_j^{(\mu)}$ é linearmente independente do conjunto $\psi_j^{(\mu)}$. A degenerescência aumenta para $2n_\mu$.
- c* O conjunto de funções de base $T\psi_j^{(\mu)}$ é linearmente independente do conjunto $\psi_j^{(\mu)}$. A degenerescência aumenta para $2n_\mu$. Esse caso não ocorre para grupos cristalográficos pontuais.

$T^2 = -1$, spin total semi-inteiro:

- a* O conjunto de funções de base $T\psi_j^{(\mu)}$ é linearmente independente do conjunto $\psi_j^{(\mu)}$. A degenerescência aumenta para $2n_\mu$.
- b* O conjunto de funções de base $T\psi_j^{(\mu)}$ é linearmente independente do conjunto $\psi_j^{(\mu)}$. A degenerescência aumenta para $2n_\mu$.
- c* O conjunto de funções de base $T\psi_j^{(\mu)}$ é linearmente dependente do conjunto $\psi_j^{(\mu)}$, e não há degenerescência além da degenerescência n_μ . Wigner mostrou que nesse caso n_μ deve ser par.

A.4.1 Inversão Temporal e o grupo D_N

As RI do grupo D_N enquadram-se no caso *a*, pois todas as RI podem ser construídas apenas com elementos de matriz reais, Tabelas 2.1 e 2.2.

Para as cadeias de spin com número par de spins $\frac{1}{2}$, ou seja que têm spin total inteiro, e com condições de contorno periódicas — associadas ao grupo de simetria D_N , cujas RI, pelo menos para N par, enquadram-se no caso a — não há degenerescências provenientes da simetria de inversão temporal. De maneira que levando em consideração apenas as simetrias espaciais e a simetria de inversão temporal, se espera que as máximas degenerescências para as cadeias com CCP sejam duplas, associadas às RI de dimensão *dois* do grupo D_N .

A.4.2 Teste de Frobenius-Schur

Cada uma das possibilidades a , b ou c apresentadas na seção anterior pode ser discriminada pelo teste de Frobenius-Schur. Esse teste é útil quando não se conhecem as RI do grupo de simetria, mas se conhecem os caracteres. No teste de Frobenius-Schur calcula-se a soma dos caracteres dos quadrados de todos os elementos do grupo correspondentes a uma dada RI $\Gamma^{(\mu)}$,

$$\sum_R \chi^{(\mu)}(R^2). \quad (\text{A.12})$$

Se essa soma for igual a g , a ordem do grupo \mathcal{G}^E , obtém-se o caso a , se for igual a 0, o caso b , e se for igual a $-g$, o caso c .

Apêndice B

Quatro sítios

B.1 Diagonalização com Teoria de Grupos

Com a finalidade de ilustrar-se o processo de diagonalização da matriz de um Hamiltoniano que comuta com um grupo de simetria espacial, através do uso dos Operadores de Projeção da Teoria das Representações, tomar-se-á como exemplo uma pequena cadeia com quatro spins $\frac{1}{2}$. Esse processo foi desenvolvido durante o período de iniciação científica. Será construída uma base de estados associada ao subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , a qual refletirá as simetrias espaciais do Hamiltoniano de uma cadeia de spins com condições de contorno periódicas, CCP. Trata-se de um detalhamento do procedimento indicado na seção 2.2. Em seguida serão escritos e diagonalizados os blocos da matriz que representa o Hamiltoniano na referida base. O Hamiltoniano a ser analisado é o de Heisenberg com anisotropia axial na constante de troca, chamado de XXZ:

$$\mathcal{H}_{XXZ} = J^{(1)} \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^+ + S_i^- S_{i+1}^-) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right]. \quad (\text{B.1})$$

onde o índice de sítio $N + 1$ deve ser entendido como sendo 1. O Hamiltoniano XXZ comuta com o operador S^z , de maneira que se pode diagonalizar separadamente sua matriz no subespaço definido por um autovalor particular de S^z . Para um sistema com quatro spins $\frac{1}{2}$, o espaço completo de estados tem dimensão $(2^N)_{N=4} = 16$, enquanto que o subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z tem dimensão $(N N/2)_{N=4} = 6$. Neste apêndice serão tomados $\hbar = 1$ e a integral de troca do Hamiltoniano $J^{(1)} = 1$.

Tabela B.1: Base dos estados do tipo produto direto para $N = 4$ e autovalor nulo de S^z .

$$|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle.$$

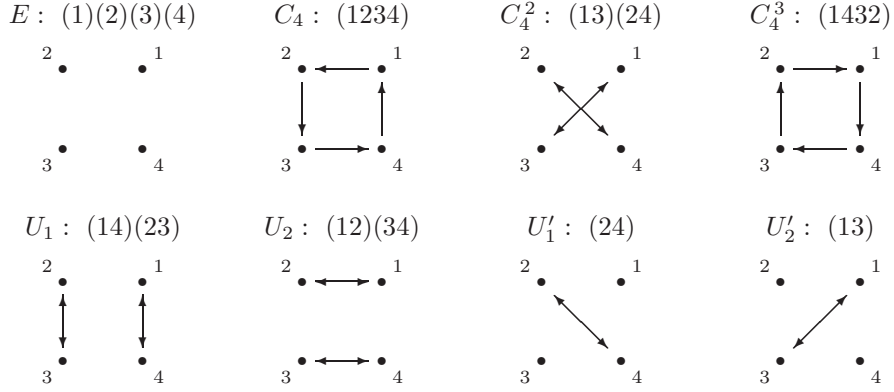


Figura B.1: Os oito elementos de simetria do grupo D_4 , associado à uma cadeia com CCP com quatro sítios. Identidade: E . Rotações: C_4 , C_4^2 e C_4^3 , ao redor do eixo de mais alta simetria, U_1 e U_2 ao redor de eixos de ordem *dois* que não passam por nenhum sítio, U_1' e U_2' ao redor de eixos de ordem *dois* que passam por *dois* sítios.

O ponto de partida é a base dos estados do tipo produto direto $|M_l\rangle$, (A.3), Tabela B.1, e os Operadores de Projeção do grupo de simetria espacial do Hamiltoniano. O grupo de simetria de uma cadeia com quatro spins é o D_4 , Figura B.1. Esse grupo tem *quatro* Representações Irredutíveis unidimensionais: $\Gamma^{I,1}$, $\Gamma^{I,2}$, $\Gamma^{I,3}$ e $\Gamma^{I,4}$ e *uma* RI bidimensional: $\Gamma^{II,1}$, (2.18). É definido *um* Operador de Projeção (A.5) para cada RI unidimensional e para cada coluna da RI bidimensional. Os OP associados às RI unidimensionais são construídos através dos elementos dessas RI e os OP associados à RI bidimensional são construídos através dos elementos da diagonal das matrizes da representação $\Gamma^{II,1}$, Tabela B.2. Essa Tabela foi obtida a partir das Tabelas 2.1 e 2.2. Os Operadores de Projeção estão iniciados na Tabela B.3.

A fim de se conhecer a ação de um Operador de Projeção em estados do tipo produto direto, como aqueles indicados na Tabela B.1, deve-se conhecer como os elementos do grupo atuam sobre tais estados. A Tabela B.4 mostra como os elementos do grupo D_4 atuam sobre os estados do tipo produto direto indicados na Tabela B.1. Exemplos da ação de um OP sobre estados do tipo produto direto são:

$$P^{I,3} |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle = \frac{1}{4} [|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle], \quad (B.2)$$

$$P^{I,3} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = -\frac{1}{4} [|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle], \quad (B.3)$$

$$P^{I,3} |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle = 0. \quad (B.4)$$

O estado gerado através da aplicação de um OP nem sempre resulta normalizado, e um mesmo OP aplicado em diferentes estados pode gerar estados proporcionais. Exemplos são os estados indicados em

Tabela B.2: Grupo D_4 : Representações Irredutíveis de dimensão um , Tabela 2.1, elementos diagonais da RI de dimensão $dois$, Tabela 2.2. Caracteres da RI de dimensão $dois$. Caracteres da representação redutível de dimensão $seis$ gerada pelo subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z .

	E	C_4	C_4^2	C_4^3	U_1	U_2	U'_1	U'_2
	(1)(2)(3)(4)	(1234)	(13)(24)	(1432)	(14)(23)	(12)(34)	(24)	(13)
$\Gamma^{I,1}$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma^{I,2}$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
$\Gamma^{I,3}$	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1
$\Gamma^{I,4}$	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1
$\Gamma_{i=1}^{II,1}$	1	0	-1	0	-1	1	0	0
$\Gamma_{i=2}^{II,1}$	1	0	-1	0	1	-1	0	0
$\chi^{II,1}$	2	0	-2	0	0	0	0	0
$\chi^{(z,0)}$	6	0	2	0	2	2	2	2

Tabela B.3: Operadores de Projeção do grupo D_4 .

$$\begin{aligned}
P^{I,1} &= \frac{1}{8}[(1)(2)(3)(4)+(1234)+(13)(24)+(1432)+(14)(23)+(12)(34)+(24)+(13)] \\
P^{I,2} &= \frac{1}{8}[(1)(2)(3)(4)+(1234)+(13)(24)+(1432)-(14)(23)-(12)(34)-(24)-(13)] \\
P^{I,3} &= \frac{1}{8}[(1)(2)(3)(4)-(1234)+(13)(24)-(1432)+(14)(23)+(12)(34)-(24)-(13)] \\
P^{I,4} &= \frac{1}{8}[(1)(2)(3)(4)-(1234)+(13)(24)-(1432)-(14)(23)-(12)(34)+(24)+(13)] \\
P_{i=1}^{II,1} &= \frac{2}{8}[(1)(2)(3)(4) \quad \quad \quad -(13)(24) \quad \quad \quad -(14)(23)+(12)(34)] \\
P_{i=2}^{II,1} &= \frac{2}{8}[(1)(2)(3)(4) \quad \quad \quad -(13)(24) \quad \quad \quad +(14)(23)-(12)(34)]
\end{aligned}$$

Tabela B.4: Ação dos operadores do grupo D_4 nos estados do tipo produto direto indicados na Tabela B.1.

	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$
$E : (1)(2)(3)(4)$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$
$C_4 : (1234)$	$ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$
$C_4^2 : (13)(24)$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$
$C_4^3 : (1432)$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$
$U_1 : (14)(23)$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$
$U_2 : (12)(34)$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$
$U'_1 : (24)$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$
$U'_2 : (13)$	$ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$

Tabela B.5: Uma base de estados no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z , que reflete a simetria do grupo D_4 .

$$\begin{aligned}
|P_{\mu=I,1}^{\beta=1}\rangle &= \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\
|P_{\mu=I,1}^{\beta=2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) \\
|P_{\mu=I,3}^{\beta=1}\rangle &= \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\
|P_{\mu=I,4}^{\beta=1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) \\
|P_{\mu=II,1;i=1}^{\beta=1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle) \\
|P_{\mu=II,1;i=2}^{\beta=1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle)
\end{aligned}$$

(B.2) e (B.3). As projeções de alguns estados feitas por certos projetores podem resultar em estados nulos, como por exemplo o estado indicado em (B.4).

Todos os Operadores de Projeção foram aplicados sobre os estados do tipo produto direto, Tabela B.1. Após descarte de estados proporcionais repetidos e normalização, os estados não nulos gerados,¹ $|P_r^\beta\rangle$, constituem uma base como aquela mostrada na Tabela B.5. Nesse caso simples da cadeia com quatro sítios não é necessário o procedimento de ortogonalização mencionado na seção 2.2.4, para a construção da base dos estados $|P_r^\beta\rangle$.

¹O índice r simboliza o conjunto dos dois índices μ e i de uma Representação Irredutível do grupo de simetria espacial que comuta com o Hamiltoniano e de uma coluna dessa RI, como foi explicado após (2.30). O índice β apenas distingue estados associados a uma mesma simetria.

Tabela B.6: Autovalores e auto-estados do Hamiltoniano Heisenberg isotrópico, $\Delta = 1$, para $N = 4$ no subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z . Os auto-estados estão rotulados pelas RI do grupo espacial D_4 . Os estados $|P_r^\beta\rangle$ estão indicados na Tabela B.5.

E_ζ^r	$ r \zeta\rangle$	
-2	$ \mu = \text{I}, 1; \zeta = 1\rangle$	$= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(P_{\mu=\text{I},1}^{\beta=1}\rangle - \sqrt{2} P_{\mu=\text{I},1}^{\beta=2}\rangle \right)$ $= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2} (\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle) - (\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) \right)$
+1	$ \mu = \text{I}, 1; \zeta = 2\rangle$	$= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\sqrt{2} P_{\mu=\text{I},1}^{\beta=1}\rangle + P_{\mu=\text{I},1}^{\beta=2}\rangle \right)$ $= \frac{1}{\sqrt{6}} (\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle)$
0	$ \mu = \text{I}, 3; \zeta = 1\rangle$	$= P_{\mu=\text{I},3}^{\beta=1}\rangle$
-1	$ \mu = \text{I}, 4; \zeta = 1\rangle$	$= P_{\mu=\text{I},4}^{\beta=1}\rangle$
0	$ \mu = \text{II}, 1; i = 1; \zeta = 1\rangle$	$= P_{\mu=\text{II},1;i=1}^{\beta=1}\rangle$
0	$ \mu = \text{II}, 1; i = 2; \zeta = 1\rangle$	$= P_{\mu=\text{II},1;i=2}^{\beta=1}\rangle$

O Hamiltoniano apresenta elementos de matriz nulos entre estados associados a RI diferentes ou a colunas diferentes de uma RI. A matriz do Hamiltoniano na base dos estados indicados na Tabela B.5 tem a forma de blocos situados na diagonal principal. Cada um dos estados $|P_{\mu=\text{I},3}^{\beta=1}\rangle$, $|P_{\mu=\text{I},4}^{\beta=1}\rangle$, $|P_{\mu=\text{II},1;i=1}^{\beta=1}\rangle$ e $|P_{\mu=\text{II},1;i=2}^{\beta=1}\rangle$ define um bloco unidimensional, e é um auto-estado do Hamiltonino. Os dois estados restantes, $|P_{\mu=\text{I},1}^{\beta=1}\rangle$ e $|P_{\mu=\text{I},1}^{\beta=2}\rangle$, são definidos pela mesma simetria, $\Gamma^{\text{I},1}$, e definem um bloco bidimensional do Hamiltoniano. Combinações lineares daqueles dois estados geram dois auto-estados do Hamiltoniano através da diagonalização de uma matriz de ordem *dois*. Os autovalores correspondentes aos quatro blocos unidimensionais são respectivamente: $0, -\Delta, 0, 0$. A matriz associada ao bloco bidimensional e seus autovalores são:

$$\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & -\Delta \end{bmatrix}, \quad \frac{-\Delta \pm \sqrt{\Delta^2 + 8}}{2}. \quad (\text{B.5})$$

Para o Hamiltoniano Heisenberg isotrópico, $\Delta = 1$, esses dois autovalores são -2 e 1 , e estão associados respectivamente aos auto-estados indicados na Tabela B.6. O fato de os blocos de matriz do Hamiltoniano neste exemplo terem dimensões *um* e *dois* é uma particularidade do número de sítios da cadeia ser igual a quatro.

Há uma degenerescência tripla de níveis, correspondentes ao autovalor 0 do Hamiltoniano, para qualquer valor não nulo do parâmetro de anisotropia: $\Delta \neq 0$. Esses três níveis estão associados às RI $\Gamma^{I,3}$ e $\Gamma^{II,1}$ do grupo D_4 . Degenerescências entre níveis associados à diferentes RI são chamadas de *acidentais*. Quando um grupo descreve todas as simetrias de um Hamiltoniano, as degenerescências estão associadas a uma única RI. É possível que um grupo de simetria que inclua operações das coordenadas de spin, além das coordenadas espaciais, tenha uma RI tridimensional associada à essa degenerescência tripla. No caso particular de $\Delta = 0$, o que corresponde ao Hamiltoniano XX com interações de troca envolvendo duas componentes do spin, há uma degenerescência entre quatro níveis associados às RI $\Gamma^{I,3}$, $\Gamma^{I,4}$ e $\Gamma^{II,1}$. Tal degenerescência maior indica que o Hamiltoniano XX tem mais operações de simetria que o XXZ.

Diagonalização sem Teoria de Grupos

Deve-se notar que na base dos estados do tipo produto direto, Tabela B.1, é necessário diagonalizar-se uma matriz de ordem *seis*. Para o Hamiltoniano Heisenberg XXZ tal matriz é:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\Delta & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & -\Delta & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.6})$$

a qual fornece os mesmos autovalores, e os mesmos auto-estados.

B.1.1 Dimensões dos Subespaços

Nesta seção será mostrado em maiores detalhes o procedimento exposto na seção 2.2.3. O interesse está na decomposição de uma representação $\Gamma^{(z)}(R)$, de um subespaço definido por algum autovalor de S^z , em termos das Representações Irredutíveis do grupo D_N . Isso permite determinar as dimensões dos subespaços caracterizados pelas simetrias das RI do grupo de simetria espacial, antes que uma base seja construída.

O cálculo dessa decomposição requer o conhecimento apenas dos caracteres das representações, ao invés de suas formas matriciais, e é realizado através da fórmula (2.22). Os caracteres $\chi^{(z)}(R)$ referentes à uma representação $\Gamma^{(z)}(R)$ podem ser obtidos através da expressão (2.23). A Tabela 2.3 apresenta em forma analítica os caracteres $\chi^{(z,0)}(R)$, para o caso particular do subespaço definido pelo autovalor nulo

de S^z em um sistema com número par de spins $\frac{1}{2}$. Para um sistema com quatro spins $\frac{1}{2}$ tais caracteres estão indicados na Tabela B.2.

O número de vezes que a RI $\Gamma^{I,3}$, por exemplo, está contida em $\Gamma^{(z,0)}$ é:

$$a_{\mu=I,3}^{z,0} = \frac{1}{8}(1.6 + (-1).0 + 1.2 + (-1).0 + 1.2 + 1.2 + (-1).2 + (-1).2) = 1. \quad (\text{B.7})$$

Os resultados de todas as decomposições são:

$$a_{\mu=I,1}^{z,0} = 2, \quad a_{\mu=I,2}^{z,0} = 0, \quad a_{\mu=I,3}^{z,0} = 1, \quad a_{\mu=I,4}^{z,0} = 1, \quad a_{\mu=II,1}^{z,0} = 1. \quad (\text{B.8})$$

De maneira que a decomposição da representação do subespaço definido pelo autovalor nulo de S^z em termos das RI do grupo D_4 é:

$$\Gamma^{(z,0)} = 2\Gamma^{I,1} \oplus 0\Gamma^{I,2} \oplus 1\Gamma^{I,3} \oplus 1\Gamma^{I,4} \oplus 1\Gamma^{II,1}. \quad (\text{B.9})$$

Essa expressão quer dizer que, de acordo com as simetrias do grupo D_4 , há *um* subespaço de dimensão *dois* associado à RI $\Gamma^{I,1}$, *dois* subespaços de dimensão *um* associados às RI $\Gamma^{I,3}$ e $\Gamma^{I,4}$ e *um* subespaço de dimensão *dois* associado à RI $\Gamma^{II,1}$. Este último pode ser ainda repartido em *dois* subespaços de dimensão *um*, cada um especificado por cada uma das colunas dessa RI $\Gamma^{II,1}$. Essas dimensões são as mesmas encontradas através da diagonalização explícita desenvolvida nesta seção. O número de vezes que cada RI aparece na decomposição de $\Gamma^{(z)}(R)$ depende do número de sítios da cadeia. Para cadeia com quatorze sítios a decomposição está indicada em (2.25).

B.2 Evoluções das Não Homogeneidades da Magnetização

Nesta seção será mostrado em maiores detalhes o cálculo da evolução temporal das não homogeneidades da magnetização indicado na seção 4.3.2.

B.2.1 Elementos de matriz de S_Q^z

Há que se calcular os elementos de matriz $\langle r' \zeta' | S_Q^z | r \zeta \rangle$ na base dos auto-estados do Hamiltoniano. Isso requer o cálculo dos elementos de matriz $\langle P_{r'}^{\beta'} | S_Q^z | P_r^\beta \rangle$ na base dos estados $|P_r^\beta\rangle$, o que requer o cálculo dos autovalores $\langle M_l | S_Q^z | M_l \rangle$, cujos auto-estados correspondentes são os estados do tipo produto direto. O operador S_Q^z , (3.1), é:

$$S_Q^z \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{iQj} S_j^z, \quad Q = q \frac{2\pi}{N}, \quad q = 0, 1, \dots, N-1. \quad (\text{B.10})$$

Tabela B.7: Autovalores de $S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z$ correspondentes aos estados do tipo produto direto indicados na Tabela B.1.

$$\begin{array}{cccccc} & |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle & |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle & |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle & |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle & |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ \langle M_l | S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z | M_l \rangle & \frac{1}{2}(-1+i) & \frac{1}{2}(1-i) & 0 & 0 & \frac{1}{2}(1+i) & \frac{1}{2}(-1-i) \end{array}$$

onde j é o índice de sítio. Como exemplo de cálculo de elementos de matriz do operador S_Q^z , serão tomados $N = 4$ e $q = 1$, para os quais $Q = \frac{\pi}{2}$:

$$S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z = \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_{j=1}^4 e^{i\frac{\pi}{2}j} S_j^z. \quad (\text{B.11})$$

na base dos estados $|M_l\rangle$

Os estados do tipo produto direto são auto-estados do operador S_Q^z . Em unidades de \hbar a ação do operador $S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z$ no estado $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$, por exemplo, é:

$$\begin{aligned} S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle &= \frac{1}{2} \left(e^{i\frac{\pi}{2}} \left(+\frac{1}{2} \right) + e^{i\frac{2\pi}{2}} \left(+\frac{1}{2} \right) + e^{i\frac{3\pi}{2}} \left(-\frac{1}{2} \right) + e^{i\frac{4\pi}{2}} \left(-\frac{1}{2} \right) \right) |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle &= \frac{1}{2}(-1+i) |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Os autovalores de $S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z$ correspondentes aos estados do tipo produto direto, Tabela B.1, estão indicados na Tabela B.7.

na base dos estados $|P_r^\beta\rangle$

Um exemplo de cálculo de um elemento de matriz é:

$$\begin{aligned} \langle P_{\mu=\text{I},1}^{\beta=1} | S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z | P_{\mu=\text{II},1;i=1}^{\beta=1} \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \left((+1)(+1) \langle \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow | S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z | \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \rangle + (+1)(-1) \langle \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow | S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z | \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2}(-1+i) - \frac{1}{2}(1-i) \right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1+i) \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Na base dos estados $|P_r^\beta\rangle$, os operadores S_Q^z não têm a forma de blocos situados na diagonal. A matriz que representa o operador $S_{Q=\frac{\pi}{2}}^z$ é simétrica. Na base onde os estados $|P_r^\beta\rangle$ estão ordenados como

mostrado na Tabela B.5, tal matriz tem a forma:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1+i) & \frac{1}{2\sqrt{2}}(1+i) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1+i) & \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1-i) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1+i) & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1+i) & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{2}}(1+i) & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1-i) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.14})$$

na base dos auto-estados do Hamiltoniano $|r\zeta\rangle$

Um exemplo de cálculo de um elemento de matriz é:

$$\begin{aligned} \langle \mu = \text{I}, 1; \zeta = 2 | S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z | \mu = \text{II}, 1; i = 1; \zeta = 1 \rangle &= \\ &= \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \langle P_{\mu=\text{I},1}^{\beta=1} | + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle P_{\mu=\text{I},1}^{\beta=2} | \right) S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z | P_{\mu=\text{II},1;i=1}^{\beta=1} \rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{1}{2\sqrt{2}}(-1+i) \right) + 0 \\ &= \frac{1}{2\sqrt{3}}(-1+i) \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Na base dos auto-estados do Hamiltoniano, $|r\zeta\rangle$, os operadores $S_{\tilde{Q}}^z$ não têm a forma de blocos situados na diagonal. A matriz que representa o operador $S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z$ é simétrica. Na base onde os auto-estados $|r\zeta\rangle$ estão ordenados como mostrado na Tabela B.6, tal matriz tem a forma:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{6}}(-1+i) & \frac{1}{2\sqrt{6}}(1+i) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}}(-1+i) & \frac{1}{2\sqrt{3}}(1+i) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1+i) & \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1-i) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{6}}(-1+i) & \frac{1}{2\sqrt{3}}(-1+i) & \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1+i) & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{6}}(1+i) & \frac{1}{2\sqrt{3}}(1+i) & \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1-i) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.16})$$

B.2.2 Evolução de $\langle S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z \rangle_t$

Será calculada a evolução do modo $\langle S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z \rangle_t$ a partir do estado inicial $|\psi_0\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$. Uma vez que tomaram-se $\hbar = 1$ e a integral de troca do Hamiltoniano $J^{(1)} = 1$, o tempo t está em unidades arbitrárias.

Produtos escalares

Os produtos escalares do estado $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ com os auto-estados do Hamiltoniano, $|r\zeta\rangle$, Tabela B.6, são:

$$\begin{aligned}\langle\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow|\mu = \text{I}, 1; \zeta = 1\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{3}} & \langle\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow|\mu = \text{I}, 4; \zeta = 1\rangle &= 0 \\ \langle\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow|\mu = \text{I}, 1; \zeta = 2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} & \langle\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow|\mu = \text{II}, 1; i = 1; \zeta = 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \langle\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow|\mu = \text{I}, 3; \zeta = 1\rangle &= \frac{1}{2} & \langle\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow|\mu = \text{II}, 1; i = 2; \zeta = 1\rangle &= 0\end{aligned}\tag{B.17}$$

Soma das exponenciais

A evolução temporal de um modo $\langle S_{\tilde{Q}}^z \rangle_t$ é dada pelas expressões (4.27) e (4.28). Em particular o modo $\langle S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z \rangle_t$, a partir do estado $|\psi_0\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ é dado por,

$$\begin{aligned}\langle S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z \rangle_t &= \langle\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow|\mu = \text{II}, 1; i = 1; \zeta = 1\rangle \\ &\quad \left\{ \langle\mu = \text{II}, 1; i = 1; \zeta = 1|S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z|\mu = \text{I}, 1; \zeta = 1\rangle \langle\mu = \text{I}, 1; \zeta = 1|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \right. \\ &\quad \left[\exp(i(E_{\zeta=1}^{\mu=\text{II},1;i=1} - E_{\zeta=1}^{\mu=\text{I},1})t) + \exp(i(E_{\zeta=1}^{\mu=\text{I},1} - E_{\zeta=1}^{\mu=\text{II},1;i=1})t) \right] + \\ &\quad \langle\mu = \text{II}, 1; i = 1; \zeta = 1|S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z|\mu = \text{I}, 1; \zeta = 2\rangle \langle\mu = \text{I}, 1; \zeta = 2|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ &\quad \left[\exp(i(E_{\zeta=1}^{\mu=\text{II},1;i=1} - E_{\zeta=2}^{\mu=\text{I},1})t) + \exp(i(E_{\zeta=1}^{\mu=\text{I},1} - E_{\zeta=2}^{\mu=\text{II},1;i=1})t) \right] + \\ &\quad \langle\mu = \text{II}, 1; i = 1; \zeta = 1|S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z|\mu = \text{I}, 3; \zeta = 1\rangle \langle\mu = \text{I}, 3; \zeta = 1|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ &\quad \left. \left[\exp(i(E_{\zeta=1}^{\mu=\text{II},1;i=1} - E_{\zeta=1}^{\mu=\text{I},3})t) + \exp(i(E_{\zeta=1}^{\mu=\text{I},3} - E_{\zeta=1}^{\mu=\text{II},1;i=1})t) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ &\quad \left\{ \frac{1}{2\sqrt{6}}(-1+i)\frac{1}{2\sqrt{3}}[\exp(i(-2-0)t) + \exp(i(0-(-2))t)] \right. \\ &\quad \frac{1}{2\sqrt{3}}(-1+i)\frac{1}{\sqrt{6}}[\exp(i(+1-0)t) + \exp(i(0-(+1))t)] \\ &\quad \left. \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1+i)\frac{1}{2}[\exp(i(0-0)t) + \exp(i(0-0)t)] \right\} \\ &= \frac{1}{2}(-1+i)\left(\frac{1}{6}\cos 2t + \frac{1}{3}\cos t + \frac{1}{2}\right).\end{aligned}\tag{B.18}$$

Na expressão acima foram utilizados os fatos de que o operador $S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z$ é simétrico e que $\langle\psi_0|r\zeta\rangle = \langle r\zeta|\psi_0\rangle$. A parte real de $\langle S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z \rangle_t$ normalizada, tal que em $t = 0$, $\text{Re} \left[\langle S_{\tilde{Q}=\frac{\pi}{2}}^z \rangle_{tn} \right] = 1$, está mostrada na Figura 4.2.

Bibliografia

- [1] M. Steiner e J. Villain: *Theoretical and experimental studies on one-dimensional magnetic systems*. Advances in Physics, 25:87–209, 1976.
- [2] G. O. Berim e G. G. Cabrera: *Long time tails in the dynamics of the spatially inhomogeneous magnetization of dimerized isotropic XY chains for spin $s = \frac{1}{2}$* . Physica A, 238:211–224, 1997.
- [3] G. O. Berim, S. Berim, e G. G. Cabrera: *Long-Time Tails and Anomalous Slowing Down in the Relaxation of Spatially Inhomogeneous Excitations in Quantum Spin Chains*. Physical Review B, 66:094401, 2002.
- [4] Tygel, D.: *Tese de Mestrado*. 2001.
- [5] Novais, E.: *Tese de Doutorado*. 2001.
- [6] Kubo, R.: *Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problem*. Journal of the Physical Society of Japan, 12:570–586, 1957.
- [7] W. Marshall e R. D. Lowde: *Magnetic correlations and neutron scattering*. Reports on Progress in Physics, 31:705–775, 1968.
- [8] J. P. Boucher, M. Ahmed Bakheit, M. Nechtschein, M. Villa, G. Bonera, e F. Borsa: *High-temperature spin dynamics in the one-dimensional Heisenberg system $(CH_3)_4NMnCl_3$ (TMMC): Spin diffusion, intra- and interchain cutoff effects*. Physical Review B, 13:4098–4118, 1976.
- [9] Karevski, D.: *Scaling behaviour of the relaxation in quantum spin chains*. European Physical Journal B, 27:147–152, 2002.
- [10] F. Iglói e H. Rieger: *Long-Range Correlations in the Nonequilibrium Quantum Relaxation of a Spin Chain*. Physical Review Letters, 85:3233–3236, 2000.
- [11] G. M. Schutz e S. Trimper: *Relaxation and aging in quantum spin systems*. Europhysics Letters, 47:164–170, 1999.

- [12] Takahashi, M.: *Thermodynamics of one-dimensional solvable models*. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [13] Hamermesh, M. : *Group theory and its application to physical problems*. Addison - Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1962.
- [14] T. Oguchi e H. Kitatani: *Some Properties of Eigenvalues and Eigenfunctions for Finite Systems on the Antiferromagnetic Heisenberg Model*. Progress of Theoretical Physics, 79:253–257, 1988.
- [15] E. Lieb, T. Schultz, e D. Mattis: *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*. Annals of Physics, 16:407, 1961.
- [16] Peres, A.: *Recurrence Phenomena in Quantum Dynamics*. Physical Review Letters, 49:1118–1118, 1982.
- [17] Sakurai, J. J.: *Modern Quantum Mechanics*. Addison - Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1995.
- [18] F. Verstraete e H. Verschelde: *Fidelity of mixed states of two qubits*. Physical Review A, 66:022307, 2002.
- [19] T.-C. Wei, D. Das, S. Mukhopadyay, S. Vishveshwara, e P. M. Goldbart: *Global entanglement and quantum criticality in spin chains*. Physical Review A, 71:060305, 2005.
- [20] D. A. Meyer e N. R. Wallach: *Global entanglement in multiparticle systems*. Journal of Mathematical Physics, 43:4273–4278, 2002.
- [21] Wootters, W.: *Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits*. Physical Review Letters, 80:2245–2248, 1998.
- [22] J. Eisert e H. J. Briegel: *Schmidt measure as a tool for quantifying multiparticle entanglement*. Physical Review A, 64:022306, 2001.
- [23] Wang, X.: *Entanglement in the quantum Heisenberg XY model*. Physical Review A, 64:012313, 2001.
- [24] A. Wong e N. Christensen: *Potential multiparticle entanglement measure*. Physical Review A, 63:044301, 2001.
- [25] V. Zelevinsky, M. Horoi, e B. A. Brown: *Information entropy, chaos and complexity of the shell model eigenvectors*. Physics Letters B, 350:141–146, 1995.
- [26] Rigolin, G. G.: *Tese de Doutorado*. 2005.

- [27] J. Stolze e D. Suter: *Quantum Computing: A Short Course from Theory to Experiment*. Wiley-VCH GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2004.
- [28] V. M. Kendon e W. J. Munro: *Entanglement and its Role in Shor's Algorithm*. quant-ph/0412140.
- [29] Lloyd, S.: *Universal quantum simulators*. Science, 273:1073, 1996.
- [30] Carvalho, J. G.: *Iniciação Científica*.
- [31] Falicov, L. M.: *Group Theory and Its Physical Applications*. The Chicago University Press, Chicago, 1966.
- [32] G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, e H. Statz: *Properties of the Thirty-Two Point Groups*. M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts, 1963.